Winmostar™ User Manual

リリース *11.18.0*

X-Ability Co., Ltd.

2026 年 10 月 28 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 26

4 基本的な操作の流れ 30

5 初期構造の作成方法 36

6 各メニュー・ウィンドウの詳細 46

7 リモートジョブ 312

8 アドオン 324

9 原子・分子構造表示の調整方法 347

10 他のソフトウェアとの連携 349

11 その他のトピック 351

12 既知の不具合 359

13 よくある質問・トラブルシューティング 365

Bibliography 424

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 の商品名およびロゴは株式会社クロスアビリティの登録商標です（商標登録第 5578852、6378452、6378453 号）。

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。

計算を実行するための基本的な操作の流れについては **基本的な操作の流れ** にてご確認ください。

分子構造の作成方法については **初期構造の作成方法** にてご確認ください。

各機能の詳細については **各メニュー・ウィンドウの詳細** にてご確認ください。

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については、 各種チュートリアル にてご確認ください。

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。

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。

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。バージョンには実際に使用したものを記入し、年にはそのバージョンがリリースされた年を記入してください。

> Winmostar V11.18.0, X-Ability Co. Ltd., Tokyo, Japan, 2025.

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エ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\:winmos11\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・ソフトウェアを使用しています。

OpenCubegen

```
OpenCubegen
  Cube Generation for Gaussian, Gamess, and MOPAC packages

Author
  Mitsuo Shoji

  mitsuo.shoji@apchem.nagoya-u.ac.jp
  Home page: http://www.geocities.jp/dr_mitsuos/index.html

Copyright (c)
  All rights reserved. 2009- by Mitsuo Shoji
```

FermiSurfer

```
Copyright (c) 2014 Mitsuaki Kawamura

Permission is hereby granted, free of charge, to any person obtaining a
copy of this software and associated documentation files (the
"Software"), to deal in the Software without restriction, including
without limitation the rights to use, copy, modify, merge, publish,
distribute, sublicense, and/or sell copies of the Software, and to
permit persons to whom the Software is furnished to do so, subject to
the following conditions:

The above copyright notice and this permission notice shall be included
in all copies or substantial portions of the Software.

THE SOFTWARE IS PROVIDED "AS IS", WITHOUT WARRANTY OF ANY KIND, EXPRESS
OR IMPLIED, INCLUDING BUT NOT LIMITED TO THE WARRANTIES OF
MERCHANTABILITY, FITNESS FOR A PARTICULAR PURPOSE AND NONINFRINGEMENT.
IN NO EVENT SHALL THE AUTHORS OR COPYRIGHT HOLDERS BE LIABLE FOR ANY
CLAIM, DAMAGES OR OTHER LIABILITY, WHETHER IN AN ACTION OF CONTRACT,
TORT OR OTHERWISE, ARISING FROM, OUT OF OR IN CONNECTION WITH THE
SOFTWARE OR THE USE OR OTHER DEALINGS IN THE SOFTWARE.
```

Abbrevia 5.0

```
https://www.mozilla.org/en-US/MPL/1.1/
```

TeeChart Standard

```
================================================
 TeeChart Standard v2018
 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␣
```

(次のページに続く)

(前のページからの続き)

```
↪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
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.
```

(次のページに続く)

(前のページからの続き)

```
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,
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,
```

(次のページに続く)

(前のページからの続き)

```
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
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
```

(次のページに続く)

(前のページからの続き)

```
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
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␣
```

(次のページに続く)

(前のページからの続き)

```
↪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
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.
```

(次のページに続く)

(前のページからの続き)

```
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 with-out 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
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
```

(次のページに続く)

(前のページからの続き)

```
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
----------------------------------------------------------------------
```

Packmol 18.168

```
MIT License

Copyright (c) 2009-2018 Leandro Martínez, José Mario Martínez, Ernesto␣
↪Birgin

Permission is hereby granted, free of charge, to any person obtaining a copy
of this software and associated documentation files (the "Software"), to␣
↪deal
in the Software without restriction, including without limitation the rights
to use, copy, modify, merge, publish, distribute, sublicense, and/or sell
copies of the Software, and to permit persons to whom the Software is
```

(次のページに続く)

(前のページからの続き)

```
furnished to do so, subject to the following conditions:

The above copyright notice and this permission notice shall be included in␣
↪all
copies or substantial portions of the Software.

THE SOFTWARE IS PROVIDED "AS IS", WITHOUT WARRANTY OF ANY KIND, EXPRESS OR
IMPLIED, INCLUDING BUT NOT LIMITED TO THE WARRANTIES OF MERCHANTABILITY,
FITNESS FOR A PARTICULAR PURPOSE AND NONINFRINGEMENT. IN NO EVENT SHALL THE
AUTHORS OR COPYRIGHT HOLDERS BE LIABLE FOR ANY CLAIM, DAMAGES OR OTHER
LIABILITY, WHETHER IN AN ACTION OF CONTRACT, TORT OR OTHERWISE, ARISING␣
↪FROM,
OUT OF OR IN CONNECTION WITH THE SOFTWARE OR THE USE OR OTHER DEALINGS IN␣
↪THE
SOFTWARE.
```

libssh2 1.10.0

```
The BSD 3-Clause License

Copyright (c) 2004-2007 Sara Golemon <sarag@libssh2.org>
Copyright (c) 2005,2006 Mikhail Gusarov <dottedmag@dottedmag.net>
Copyright (c) 2006-2007 The Written Word, Inc.
Copyright (c) 2007 Eli Fant <elifantu@mail.ru>
Copyright (c) 2009-2019 Daniel Stenberg
Copyright (C) 2008, 2009 Simon Josefsson
All rights reserved.

Redistribution and use in source and binary forms,
with or without modification, are permitted provided
that the following conditions are met:

Redistributions of source code must retain the above
copyright notice, this list of conditions and the
following disclaimer.

Redistributions in binary form must reproduce the above
copyright notice, this list of conditions and the following
disclaimer in the documentation and/or other materials
provided with the distribution.

Neither the name of the copyright holder nor the names
of any other contributors may be used to endorse or
promote products derived from this software without
specific prior written permission.

THIS SOFTWARE IS PROVIDED BY THE COPYRIGHT HOLDERS AND
CONTRIBUTORS "AS IS" AND ANY EXPRESS OR IMPLIED WARRANTIES,
INCLUDING, BUT NOT LIMITED TO, THE IMPLIED WARRANTIES
OF MERCHANTABILITY AND FITNESS FOR A PARTICULAR PURPOSE
ARE DISCLAIMED. IN NO EVENT SHALL THE COPYRIGHT OWNER OR
CONTRIBUTORS BE LIABLE FOR ANY DIRECT, INDIRECT, INCIDENTAL,
```

(次のページに続く)

(前のページからの続き)

```
SPECIAL, EXEMPLARY, OR CONSEQUENTIAL DAMAGES (INCLUDING,
BUT NOT LIMITED TO, PROCUREMENT OF SUBSTITUTE GOODS OR
SERVICES; LOSS OF USE, DATA, OR PROFITS; OR BUSINESS
INTERRUPTION) HOWEVER CAUSED AND ON ANY THEORY OF LIABILITY,
WHETHER IN CONTRACT, STRICT LIABILITY, OR TORT (INCLUDING
NEGLIGENCE OR OTHERWISE) ARISING IN ANY WAY OUT OF THE
USE OF THIS SOFTWARE, EVEN IF ADVISED OF THE POSSIBILITY
OF SUCH DAMAGE.
```

openssl 1.0.2m

```
OpenSSL License and Original SSLeay License

OpenSSL License
---------------

============================================================================
Copyright (c) 1998-2018 The OpenSSL Project.  All rights reserved.

Redistribution and use in source and binary forms, with or without
modification, are permitted provided that the following conditions
are met:

1. Redistributions of source code must retain the above copyright
   notice, this list of conditions and the following disclaimer.

2. Redistributions in binary form must reproduce the above copyright
   notice, this list of conditions and the following disclaimer in
   the documentation and/or other materials provided with the
   distribution.

3. All advertising materials mentioning features or use of this
   software must display the following acknowledgment:
   "This product includes software developed by the OpenSSL Project
   for use in the OpenSSL Toolkit. (http://www.openssl.org/)"

4. The names "OpenSSL Toolkit" and "OpenSSL Project" must not be used to
   endorse or promote products derived from this software without
   prior written permission. For written permission, please contact
   openssl-core@openssl.org.

5. Products derived from this software may not be called "OpenSSL"
   nor may "OpenSSL" appear in their names without prior written
   permission of the OpenSSL Project.

6. Redistributions of any form whatsoever must retain the following
   acknowledgment:
   "This product includes software developed by the OpenSSL Project
   for use in the OpenSSL Toolkit (http://www.openssl.org/)"

THIS SOFTWARE IS PROVIDED BY THE OpenSSL PROJECT ``AS IS'' AND ANY
EXPRESSED OR IMPLIED WARRANTIES, INCLUDING, BUT NOT LIMITED TO, THE
```

(次のページに続く)

(前のページからの続き)

```
IMPLIED WARRANTIES OF MERCHANTABILITY AND FITNESS FOR A PARTICULAR
PURPOSE ARE DISCLAIMED.  IN NO EVENT SHALL THE OpenSSL PROJECT OR
ITS CONTRIBUTORS BE LIABLE FOR ANY DIRECT, INDIRECT, INCIDENTAL,
SPECIAL, EXEMPLARY, OR CONSEQUENTIAL DAMAGES (INCLUDING, BUT
NOT LIMITED TO, PROCUREMENT OF SUBSTITUTE GOODS OR SERVICES;
LOSS OF USE, DATA, OR PROFITS; OR BUSINESS INTERRUPTION)
HOWEVER CAUSED AND ON ANY THEORY OF LIABILITY, WHETHER IN CONTRACT,
STRICT LIABILITY, OR TORT (INCLUDING NEGLIGENCE OR OTHERWISE)
ARISING IN ANY WAY OUT OF THE USE OF THIS SOFTWARE, EVEN IF ADVISED
OF THE POSSIBILITY OF SUCH DAMAGE.
====================================================================

This product includes cryptographic software written by Eric Young
(eay@cryptsoft.com).  This product includes software written by Tim
Hudson (tjh@cryptsoft.com).

Original SSLeay License
-----------------------

Copyright (C) 1995-1998 Eric Young (eay@cryptsoft.com)
All rights reserved.

This package is an SSL implementation written
by Eric Young (eay@cryptsoft.com).
The implementation was written so as to conform with Netscapes SSL.

This library is free for commercial and non-commercial use as long as
the following conditions are aheared to.  The following conditions
apply to all code found in this distribution, be it the RC4, RSA,
lhash, DES, etc., code; not just the SSL code.  The SSL documentation
included with this distribution is covered by the same copyright terms
except that the holder is Tim Hudson (tjh@cryptsoft.com).

Copyright remains Eric Young's, and as such any Copyright notices in
the code are not to be removed.
If this package is used in a product, Eric Young should be given attribution
as the author of the parts of the library used.
This can be in the form of a textual message at program startup or
in documentation (online or textual) provided with the package.

Redistribution and use in source and binary forms, with or without
modification, are permitted provided that the following conditions
are met:
1. Redistributions of source code must retain the copyright
   notice, this list of conditions and the following disclaimer.
2. Redistributions in binary form must reproduce the above copyright
   notice, this list of conditions and the following disclaimer in the
   documentation and/or other materials provided with the distribution.
3. All advertising materials mentioning features or use of this software
   must display the following acknowledgement:
   "This product includes cryptographic software written by
```

(次のページに続く)

(前のページからの続き)

```
    Eric Young (eay@cryptsoft.com)"
   The word 'cryptographic' can be left out if the rouines from the library
   being used are not cryptographic related :-).
4. If you include any Windows specific code (or a derivative thereof) from
   the apps directory (application code) you must include an␣
↪acknowledgement:
   "This product includes software written by Tim Hudson (tjh@cryptsoft.com)
↪"

THIS SOFTWARE IS PROVIDED BY ERIC YOUNG ``AS IS'' AND
ANY EXPRESS OR IMPLIED WARRANTIES, INCLUDING, BUT NOT LIMITED TO, THE
IMPLIED WARRANTIES OF MERCHANTABILITY AND FITNESS FOR A PARTICULAR PURPOSE
ARE DISCLAIMED.  IN NO EVENT SHALL THE AUTHOR OR CONTRIBUTORS BE LIABLE
FOR ANY DIRECT, INDIRECT, INCIDENTAL, SPECIAL, EXEMPLARY, OR CONSEQUENTIAL
DAMAGES (INCLUDING, BUT NOT LIMITED TO, PROCUREMENT OF SUBSTITUTE GOODS
OR SERVICES; LOSS OF USE, DATA, OR PROFITS; OR BUSINESS INTERRUPTION)
HOWEVER CAUSED AND ON ANY THEORY OF LIABILITY, WHETHER IN CONTRACT, STRICT
LIABILITY, OR TORT (INCLUDING NEGLIGENCE OR OTHERWISE) ARISING IN ANY WAY
OUT OF THE USE OF THIS SOFTWARE, EVEN IF ADVISED OF THE POSSIBILITY OF
SUCH DAMAGE.

The licence and distribution terms for any publically available version or
derivative of this code cannot be changed.  i.e. this code cannot simply be
copied and put under another distribution licence
[including the GNU Public Licence.]
```

Delphi/Pascal Wrapper around the library "libssh2"

```
The BSD 4-clause License and Mozilla Public License 1.1

Copyright (c) 2004-2009, Sara Golemon <sarag@libssh2.org>
Copyright (c) 2009 by Daniel Stenberg
Copyright (c) 2010 Simon Josefsson <simon@josefsson.org>}
All rights reserved.

Redistribution and use in source and binary forms,
with or without modification, are permitted provided
that the following conditions are met:

Redistributions of source code must retain the above
copyright notice, this list of conditions and the
following disclaimer.

Redistributions in binary form must reproduce the above
copyright notice, this list of conditions and the following
disclaimer in the documentation and/or other materials
provided with the distribution.

Neither the name of the copyright holder nor the names
of any other contributors may be used to endorse or
promote products derived from this software without
specific prior written permission.
```

(次のページに続く)

(前のページからの続き)

```
THIS SOFTWARE IS PROVIDED BY THE COPYRIGHT HOLDERS AND
CONTRIBUTORS "AS IS" AND ANY EXPRESS OR IMPLIED WARRANTIES,
INCLUDING, BUT NOT LIMITED TO, THE IMPLIED WARRANTIES
OF MERCHANTABILITY AND FITNESS FOR A PARTICULAR PURPOSE
ARE DISCLAIMED. IN NO EVENT SHALL THE COPYRIGHT OWNER OR
CONTRIBUTORS BE LIABLE FOR ANY DIRECT, INDIRECT, INCIDENTAL,
SPECIAL, EXEMPLARY, OR CONSEQUENTIAL DAMAGES (INCLUDING,
BUT NOT LIMITED TO, PROCUREMENT OF SUBSTITUTE GOODS OR
SERVICES; LOSS OF USE, DATA, OR PROFITS; OR BUSINESS
INTERRUPTION) HOWEVER CAUSED AND ON ANY THEORY OF LIABILITY,
WHETHER IN CONTRACT, STRICT LIABILITY, OR TORT (INCLUDING
NEGLIGENCE OR OTHERWISE) ARISING IN ANY WAY OUT OF THE
USE OF THIS SOFTWARE, EVEN IF ADVISED OF THE POSSIBILITY
OF SUCH DAMAGE.


Copyright (c) 2010, Zeljko Marjanovic <savethem4ever@gmail.com>
This code is licensed under MPL 1.1
For details, see http://www.mozilla.org/MPL/MPL-1.1.html
```

Balloon

```
IMPORTANT: THIS SOFTWARE END USER LICENSE AGREEMENT (EULA) IS A LEGAL
AGREEMENT BETWEEN THE LICENSEE (HEREINAFTER "YOU", EITHER AN INDIVIDUAL
OR ANY OTHER LEGAL ENTITY) AND THE COPYRIGHT OWNER(S) OF THE BALLOON
SOFTWARE (HEREINAFTER "SOFTWARE"). READ IT CAREFULLY BEFORE DOWNLOADING
AND USING THE SOFTWARE. IT PROVIDES A LICENSE TO USE THE SOFTWARE AND
CONTAINS WARRANTY INFORMATION AND LIABILITY DISCLAIMERS. BY DOWNLOADING
AND/OR USING THE PROGRAM, YOU AGREE TO BECOME BOUND BY THE TERMS OF THIS
AGREEMENT. IF YOU DO NOT AGREE TO BE BOUND BY THESE TERMS, THEN DO NOT
DOWNLOAD OR USE THE SOFTWARE AND DELETE THE SOFTWARE FILES FROM YOUR
COMPUTER SYSTEM.

1. Through any use of the Software You acknowledge your acceptance of the
conditions of this license.
2. You acknowledge and agree that the Software is proprietary to the␣
↪Copyright
owner(s), and is protected under Finnish copyright law and international
copyright treaties. You further acknowledge and agree that all right, title
and interest in and to the Software, including all intellectual property
rights, are and shall remain with the Copyright owner(s).
3. There is no fee for the use of the Software, which is provided to you
"free of charge" as a public service.
4. As is common courtesy, you agree to acknowledge your use of the Software
in any reports or publications that include any results obtained with the
Software.
5. License Grants
   1. The licensee is granted a non-exclusive license to use the Software in
   accordance with the terms of this EULA.
   2. You may redistribute unmodified copies of the Software to third␣
↪parties.
```

(次のページに続く)

(前のページからの続き)

```
   The receiver of the Software will have same rights and responsibilities␣
↪as
   if the Software would have been obtained directly from the original
   distribution site, i.e. the receiver is bound by the terms of this EULA.
6. License Restrictions
   1. You may not alter, merge, modify, adapt or translate the Software,
   or decompile, reverse engineer, disassemble, or otherwise reduce the
   Software to a human-perceivable form.
   2. You may not sell, rent, lease, or sublicense the Software.
   3. You may not modify the Software or create derivative works based upon␣
↪the Software.
7. License Termination
   In the event that you fail to comply with this EULA, the Copyright␣
↪owner(s)
   may terminate the license. Upon any termination of this EULA, you shall
   immediately discontinue the use and destroy all copies of the Software.

8. Governing Law
   This EULA shall be governed by the laws of Sweden without reference to␣
↪its
   conflict of law provisions.
   The court of Stockholm, Sweden, shall be the first instance forum for
   settlement of any disputes arising under this EULA.

9. WARRANTY DISCLAIMER
   THE COPYRIGHT OWNER(S) PROVIDE(S) NO TECHNICAL SUPPORT, WARRANTIES OR
   REMEDIES FOR THE SOFTWARE. THE PROGRAM IS PROVIDED "AS IS" AND MAY␣
↪CONTAIN
   ERRORS ("BUGS"), BE BASED ON ERRONEOUS ASSUMPTIONS, OR HAVE OTHER␣
↪DEFECTS,
   KNOWN AND UNKNOWN. CONSEQUENTLY, THERE IS NO WARRANTY WHATSOEVER FOR THE
   PROGRAM, WHETHER EXPRESSED OR IMPLIED, INCLUDING THE SUITABILITY OF THE
   PROGRAM FOR ANY PARTICULAR PURPOSE OR INFRINGEMENT; THUS YOU ACCEPT ALL
   RESPONSIBILITY WITH REGARD TO THE PERFORMANCE OF THE PROGRAM, THE RESULTS
   OBTAINED, AND THE USE AND INTERPRETATION OF SUCH RESULTS, AND ANY FUTURE
   CONSEQUENCES ARISING FROM YOUR USE OF THE PROGRAM OR RESULTS DERIVED
   THEREOF.
10. LIMITATION OF LIABILITY
   YOU AGREE NOT TO HOLD LIABLE FOR DAMAGES, IN ANY WAY, SHAPE OR FORM,
   ANY COPYRIGHT HOLDER OR OTHER PARTY HAVING THE RIGHT TO REDISTRIBUTE OR
   MODIFY THE PROGRAM. SUCH DAMAGES INCLUDE BUT ARE NOT LIMITED TO GENERAL,
   SPECIAL, INCIDENTAL OR CONSEQUENTIAL DAMAGES ARISING OUT OF THE USE OR
   INABILITY TO USE THE PROGRAM,
   LOSS OF DATA, INACCURATE MODIFICATION OF DATA, OR ANY OTHER LOSSES
   INCURRED BY YOU OR BY A THIRD PARTY AS A RESULT OF THE USE OF THE PROGRAM
   OR INABILITY TO USE THE PROGRAM, OR INABILITY OF THE PROGRAM TO WORK
   TOGETHER WITH OTHER PROGRAMS. YOU AGREE THAT THE COPYRIGHT HOLDERS AND
   OTHER RESPONSIBLE PARTIES MAY HAVE KNOWLEDGE OF SUCH DEFECTS,␣
↪INACCURACIES,
   LACK OF OPERATIONAL COMPATIBILITY WITH OTHER PROGRAMS, OR THE POSSIBILITY
   OF SUCH DAMAGES, AMONG OTHER DEFECTS, AND THAT YOU WILL NOT HOLD THESE
```

(次のページに続く)

(前のページからの続き)

```
   PARTIES LIABLE FOR ANY DAMAGES RESULTING TO YOU OR TO A THIRD PARTY
   ARISING FROM YOUR USE OF THE PROGRAM.

BALLOON Copyright © 2006-2018 Mikko Vainio.
BALLOON Copyright © 2008-2014 J. Santeri Puranen.
BALLOON Copyright © 2010 Visipoint Ltd.
All rights reserved.
```

JSME

```
Copyright (c) 2017, Novartis Institutes for BioMedical Research Inc and␣
↪Bruno Bienfait
All rights reserved.

Redistribution and use in source and binary forms, with or without
modification, are permitted provided that the following conditions are met:
    * Redistributions of source code must retain the above copyright
      notice, this list of conditions and the following disclaimer.
    * Redistributions in binary form must reproduce the above copyright
      notice, this list of conditions and the following disclaimer in the
      documentation and/or other materials provided with the distribution.
    * Neither the name of the Novartis Institutes for BioMedical Research␣
↪nor the
      names of the authors may be used to endorse or promote products
      derived from this software without specific prior written permission.

THIS SOFTWARE IS PROVIDED "AS IS" AND
ANY EXPRESS OR IMPLIED WARRANTIES, INCLUDING, BUT NOT LIMITED TO, THE␣
↪IMPLIED
WARRANTIES OF MERCHANTABILITY AND FITNESS FOR A PARTICULAR PURPOSE ARE
DISCLAIMED. IN NO EVENT SHALL COPYRIGHT HOLDERS BE LIABLE FOR ANY
DIRECT, INDIRECT, INCIDENTAL, SPECIAL, EXEMPLARY, OR CONSEQUENTIAL DAMAGES
(INCLUDING, BUT NOT LIMITED TO, PROCUREMENT OF SUBSTITUTE GOODS OR SERVICES;
LOSS OF USE, DATA, OR PROFITS; OR BUSINESS INTERRUPTION) HOWEVER CAUSED AND
ON ANY THEORY OF LIABILITY, WHETHER IN CONTRACT, STRICT LIABILITY, OR TORT
(INCLUDING NEGLIGENCE OR OTHERWISE) ARISING IN ANY WAY OUT OF THE USE OF␣
↪THIS
SOFTWARE, EVEN IF ADVISED OF THE POSSIBILITY OF SUCH DAMAGE.

JSME uses code from the following libraries:
    - Apache Harmony -  Apache License v2.0  http://www.apache.org/licenses/
    - gwt-mosaic     -  Apache License v2.0  http://www.apache.org/licenses/
    - gwt-exporter   -  Apache License v2.0  http://www.apache.org/licenses/
    - gwt            -  Apache License v2.0  http://www.apache.org/licenses/
    - OpenChemLib    -  https://github.com/Actelion/openchemlib/blob/master/
↪LICENSE
    - InChI 1.05     -  http://www.inchi-trust.org/
    - emscripten     -  https://kripken.github.io/emscripten-site/index.html
```

Spglib

```
BSD 3-Clause "New" or "Revised" License

Copyright (c) 2014, Atsushi Togo
All rights reserved.

Redistribution and use in source and binary forms, with or without
modification, are permitted provided that the following conditions
are met:

* Redistributions of source code must retain the above copyright
  notice, this list of conditions and the following disclaimer.
* Redistributions in binary form must reproduce the above copyright
  notice, this list of conditions and the following disclaimer in the
  documentation and/or other materials provided with the distribution.
* Neither the name of the <organization> nor the
  names of its contributors may be used to endorse or promote products
  derived from this software without specific prior written permission.

THIS SOFTWARE IS PROVIDED BY THE COPYRIGHT HOLDERS AND CONTRIBUTORS
"AS IS" AND ANY EXPRESS OR IMPLIED WARRANTIES, INCLUDING, BUT NOT
LIMITED TO, THE IMPLIED WARRANTIES OF MERCHANTABILITY AND FITNESS FOR
A PARTICULAR PURPOSE ARE DISCLAIMED. IN NO EVENT SHALL <COPYRIGHT
HOLDER> BE LIABLE FOR ANY DIRECT, INDIRECT, INCIDENTAL, SPECIAL,
EXEMPLARY, OR CONSEQUENTIAL DAMAGES (INCLUDING, BUT NOT LIMITED TO,
PROCUREMENT OF SUBSTITUTE GOODS OR SERVICES; LOSS OF USE, DATA, OR
PROFITS; OR BUSINESS INTERRUPTION) HOWEVER CAUSED AND ON ANY THEORY OF
LIABILITY, WHETHER IN CONTRACT, STRICT LIABILITY, OR TORT (INCLUDING
NEGLIGENCE OR OTHERWISE) ARISING IN ANY WAY OUT OF THE USE OF THIS
SOFTWARE, EVEN IF ADVISED OF THE POSSIBILITY OF SUCH DAMAGE.
```

GEMMI

```
https://www.mozilla.org/en-US/MPL/2.0/
```

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 11 (64bit, x86 および Arm)

Windows 7, 8, 10 については概ね動作しますが動作保証対象外となります。

Arm 系 CPU については **最小・推奨スペック** をご確認ください。

Windows Server の場合は、予め無償版またはトライアルをご入手頂き、動作検証した上でご使用下さい。

macOS, Linux をご利用の方は、VirtualBox などの仮想環境上に Windows OS をインストールしたうえでご使用頂けます。

32bit 版 OS 上でも概ね動作しますが、無料トライアルで評価の上ご購入下さい。

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 11 のシステム要件に準ず (x86 系および Arm 系 CPU に対応)
- HDD: 20 GB 以上の空き容量

一般的な事務作業、ネットサーフィンなどをする程度のパソコンでも動作します。

ソフトウェアの動作にネットワーク接続は必須でないため、ネットワークに接続していないパソコンでも Winmostar を使用可能です。

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。

弊社において Arm 系 CPU で動作確認した組み合わせを以下に示します。

表 1: 動作確認ができている Arm 系 CPU 環境

動作確認日時	Winmostar	CygwinWM	OS	OS ビルド	プロセッサ	Windows 機能エクスペリエンスパック	備考
2026 年 6 月 22 日	V11.16.2	20250701	Windows 11 Pro 25H2	26200.8655	Snapdragon X Plus (8-core) @ 3.30 GHz (3.24 GHz)	1000.26100	注 1

注 1: 「OpenCL、OpenGL、および Vulkan 互換機能パック」をアンインストールする必要があります。

2.3 ソルバの推奨バージョン

表 2: ソルバの推奨バージョン

MOPAC	6, 7
GAMESS	2020-R2
NWChem	7.0.2
Gaussian	16
Quantum ESPRESSO	7.1
OpenMX	3.8
Gromacs	2024.4
LAMMPS	2021 年 09 月 29 日版

ここに記載されているバージョン以外においても概ね動作しますが、動作保証対象外のため動作検証を行った上でご使用ください。

2.4 推奨するリモートサーバ

インストール方法 では CentOS 向けの手順を紹介していますが、以下の機能を備えていれば Ubuntu など各種 Linux OS が利用可能です。

- SSH、SCP を用いた通信が可能である
- bash や csh などの標準的なシェルを備える
- 標準的な UNIX コマンドを実行できる

- Winmostar から使用する各種ソルバをインストール、利用できる

リモートサーバ上でジョブのスケジューリングを行いたい場合は、リモートサーバに以下のジョブスケジューラのインストールが必要です。ジョブのスケジューリングが不要で、かつ SSH 接続先のノードで直接計算を実行できる場合は、ジョブスケジューラをインストールせずに使うことができます。また、 有償サポートにおけるカスタマイズ 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。

- **推奨**
  - Torque, OpenPBS, PBS Professional (PBS)
  - Sun Grid Engine (SGE), Univa Grid Engine (UGE), Altair Grid Engine (AGE)
  - Slurm Workload Manager (SLURM)
  - FUJITSU Software Technical Computing Suite (PJM)
  - IBM Platform Load Sharing Facility (LSF)

2.5 インストール

下記の方法で想定通りにインストールできない場合は、 **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. ライセンスコードを取得していない場合は、以下のリンク先にてライセンスを登録し取得します。各版の違いは 機能一覧 で確認できます。
   - 無償版
   - 学生版
   - プロフェッショナル版
   - プロフェッショナル版（トライアル）
2. 安定版最新バージョンの Winmostar インストーラ をダウンロードします。

   注釈:
   - 動作環境は **最小・推奨スペック** でご確認ください。
   - USB メモリ・DVD・ユーザポータルでインストーラを入手済みの方は、この操作が不要です。

3. インストーラをダブルクリックして起動し [次へ] をクリックします。[コンポーネントを選んでください] の画面では、[64bit 実行ファイル] にチェックが入った状態で [次へ] をクリックしてください。

   警告:
   - Winmostar が起動している場合は、あらかじめ終了しておきます。
   - 32bit 版は Winmostar V11.5.0 から非推奨となりました。

4. [インストール] をクリックしてインストールを開始します。必要に応じて [参照] をクリックしてインストール先フォルダを変更します（デフォルトは C:\winmos11）。

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。詳細は こちら 。
- C:\Program Files 以下へのインストールは不可です。

注釈:

- インストール完了後、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。
- 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。
- バージョンアップの方は **アップデート** または **アップグレード** を確認してください。

5. 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。

警告:

- Arm 系 CPU の場合は、Windows の設定 → アプリ → インストールされているアプリ、にて「OpenCL、OpenGL、および Vulkan 互換機能パック」をアンインストールしないと、Winmostar の表示が乱れることがあります。

注釈:

- 納品したライセンス入りインストーラを使用した場合は、この操作が不要です。

6. こちらの手順 に従い Winmostar 用の Cygwin 環境を構築します。

注釈:

- NWChem（シリアル実行版のみ）, Quantum ESPRESSO, OpenMX, LAMMPS, Gromacs, MODYLAS, Towhee は CygwinWM の中に同梱されています。（ただし、NWChem, Quantum ESPRESSO, LAMMPS は CygwinWM 2023/04/05 バージョン以降で同梱されます。
- NWChem を並列実行したい場合は次に手順で NWChem インストールマニュアルに従い MPICH をインストールする必要があります。

7. 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について、以下のリンク先の手順でインストールします。リモートサーバでのみ計算を行う場合もローカルマシンにインストールする必要があります。NWChem（シリアル実行版）、Quantum ESPRESSO、OpenMX、LAMMPS、Gromacs、Towhee はすでに CygwinWM と同時にインストールされているのでここでインストールする必要ありません。

- 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 Gaussian 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
- Windows 版 AkaiKKR 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

Winmostar V11.4.X 以前を利用、CygwinWM 2022/07/15 バージョン以前を利用、または 32bit 環境（非推奨）を利用の方は以下も参照してください。

- Windows 版 Quantum ESPRESSO 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

注釈:

- ポリマービルダを利用するためには LAMMPS のインストールが必要です。（Winmostar V11.4.X 以前または CygwinWM 2022/07/15 バージョン以前の場合）
- 使用する予定のないソルバをインストールする必要はありません。
- 最大原子数を拡張した MOPAC6 を使う場合は 独自拡張版 MOPAC6 から入手してください（動作未保障）。

---

8. 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、CygwinWM、ソルバのインストールフォルダを監視対象から除外します。
9. 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します。
   - 必須ではありません。
   - 設定方法が分からない場合は *Q. Windows* **のエクスプローラ上で拡張子を表示するにはどうしたらいいですか？** で確認してください。
10. リモートサーバへのジョブ投入と、リモートサーバ上でのジョブのスケジューリングを行いたい場合は、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します。入っていない場合は例えば以下のリンク先の手順で Slurm をインストールします。
    - Slurm インストール方法（Rocky Linux 向け）

注釈:

- ジョブのスケジューリングが不要で、かつ SSH 接続先のノードで直接計算を実施できる場合は、リモートサーバ上にジョブスケジューラをインストールする必要がありません。
- Winmostar からは *Slurm* **以外の各種ジョブスケジューラ** も利用可能なため、必ずしも Slurm をインストールする必要はありません。新規にジョブスケジューラをインストールする場合は、Slurm の手順が比較的簡単であるため、ここでは Slurm のインストール方法を紹介しています。

---

11. リモートサーバへのジョブ投入を行う場合は、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 GAMESS インストールマニュアル
- Linux 版 NWChem 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
- 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
- Linux 版 VASP インストールマニュアル
- Linux 版 DCDFTBMD インストールマニュアル

12. 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。

2.6 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。

2.7 アップデート

アップデート（マイナーバージョン・リビジョンの更新）はインストールと同じ方法で実施できます。

例：V11.0.0→V11.1.0、V9.4.0→V9.4.5

- 古いバージョンを残してインストールする場合は、古いバージョンの UserPref フォルダ以下のファイルを、新しいバージョンの UserPref フォルダの以下にコピーすることで、設定を引き継ぐことができます。
- UserPref フォルダは Winmostar のインストールフォルダ以下にあります。

2.8 アップグレード

アップグレード（メジャーバージョンの更新）はインストールと同じ方法で実施できます。

例：V8.000→V9.0.0、V10.0.0→V11.0.0

- V3～V6 からアップグレードする場合、古いバージョンのインストールフォルダ以下の設定ファイル atoms1.wmx、winmos_server.ini、wm_nmr.ref、wm_irscale.ref を V11 の UserPref フォルダ以下にコピーすることで、設定を引き継ぐことができます。
- V7～V10 からアップグレードする場合、古いバージョンの UserPref フォルダ以下の wmset.ini、atoms1.wmx、winmos_server.ini、wm_nmr.ref、wm_irscale.ref を V11 の UserPref フォルダ以下にコピーすることで、設定を引き継ぐことができます。
- UserPref フォルダは Winmostar のインストールフォルダ以下にあります。
- 詳細は V11 移行ガイド 、 V10 移行ガイド 、 V9 移行ガイド を参照してください。

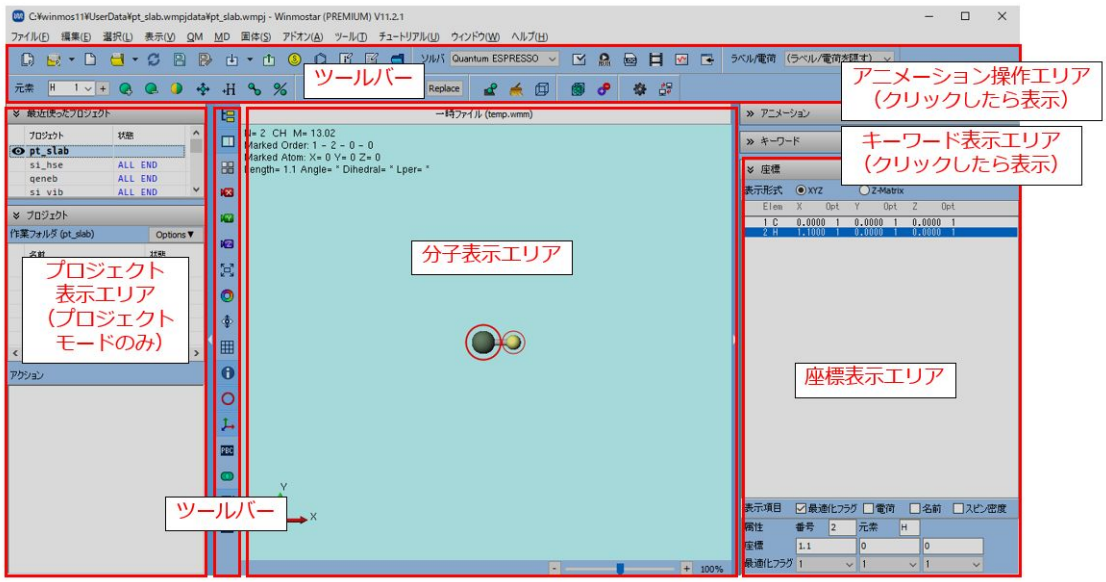
Chapter 3

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ィンドウ（**メインウィンドウ** と呼ぶ）は下図の様な構成となっています。

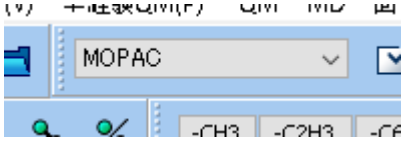
メインウィンドウのタイトルには現在編集中のファイルの名前、使用中の Winmostar のライセンスとバージョンが表示されます。



ツールバー

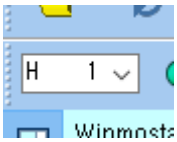
メインメニューの中でよく使われる機能をここでも選択することができます。ポインタを重ねるとそれぞれのボタンの役割を確認できます。また、以下の機能のみ特殊な動作をします。

- 上部のツールバーの 1 行目中央の **ソルバ** 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 **元素** 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。

プロジェクト表示エリア

過去に作成したプロジェクトが **最近使ったプロジェクト** に表示されます。項目をダブルクリックするとそのプロジェクトが開かれます。プロジェクト表示エリアはプロジェクトモードでのみ表示されます。

作業フォルダ には、現在開かれているプロジェクトの作業フォルダが表示されます。 *Options* をクリックすると選択された作業フォルダに対する操作を選択できます。項目をダブルクリックするとその作業フォルダの入力ファイルが開かれます。目玉のアイコンは分子表示エリアで表示されているファイルを含む作業フォルダに出現します。そのフォルダが **作業フォルダ** で選択されていない場合は目玉のアイコンが赤く表示されます。

アクション には、 **作業フォルダ** で選択された作業フォルダに対する操作が出現します。

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。赤丸は **原子選択マーカー** 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。

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。電荷かスピンを持つ構造の場合は、下部に電荷の合計値（Qtot）と二乗平均平方根（Qrms）が表示されます。量子化学計算で得られた波動関数から直接算出した双極子モーメントが量子化学計算のログから読み込まれた場合は、その値も表示されます。セルを持つ構造の場合は、下部に密度と格子定数が表示されます。

プロジェクトモードでは分子表示エリア上部に表示中のファイル名が表示されます。表示中のファイルが **作業フォルダ** で選択されている作業フォルダに含まれていない場合は赤字で表示されます。

アニメーション操作エリア

アニメーションの操作ボタンが表示されます。タイトルをクリックすると表示/非表示を切り替えることができます。

キーワード表示エリア

各ソルバのキーワード設定ウィンドウで設定した内容が表示されます。キーワード内の分子構造に依存する部分には%WM_XYZ%、%WM_ZMAT%などのエイリアス文字が出現します。タイトルをクリックすると表示/非表示を切り替えることができます。

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 **表示形式** で表示する形式を切り替えることができます。デフォルトでは *XYZ* 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。タイトルをクリックすると表示/非表示を切り替えることができます。

3.2 マウス操作

メインウィ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	コンテキストメニューを表示	表示の拡大・縮小
Shift	分子単位でグループ選択または解除	視線の平行移動	原子を削除	
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		
Ctrl+Shift			フラグメントを置換	

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
表示をウィンドウに合わせる	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、第一原理計算、あるいは分子動力学計算を流す基本的な流れを紹介します。

Winmostar を起動し、プロジェクトモードの場合は **ファイル** → **新規プロジェクト** 、ファイルモードの場合は **ファイル** → **新規ファイル** をクリックします。

プロジェクトモード
: 個々のファイルを意識することなくジョブを管理することができます。無償版以外のユーザにはこのモードを使うことを推奨します。

ファイルモード
: 個々のファイルに対し明示的に操作を行います。V10 以前と互換性のある手順で操作できます。無償版またはプロジェクトモードに非対応のソルバ・ジョブスケジューラを使う場合や、Winmostar 以外で作成された各ソルバの入力ファイルを用いて計算を流す場合はこのモードを使います。

4.1 プロジェクトモードの場合

プロジェクトを構成するファイルの説明は **新規プロジェクト** で確認できます。

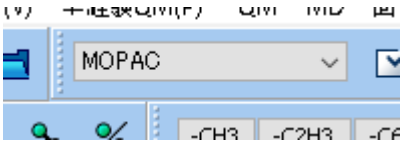
(1) 初期構造を作成

ファイル → **新規プロジェクト** をクリックし、 **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。

既存の構造ファイルを開いている状態などファイルモードからプロジェクトモードに移行する場合は **ファイル** → **現在の構造で新規プロジェクト** をクリックします。

既存の構造ファイルに対し計算を流したい場合、**ファイル** → **新規プロジェクト** をクリックした後 **ファイル** → **ファイルをインポート** を使って構造を読み込む方法もあります。

(2) 計算条件（キーワード）の設定

上部のツールバーの **ソルバ** プルダウンメニュー 

で使

用したいソルバを選び、 **ワークフロー設定** ボタン をクリックします。

# of Jobs で今回実行するジョブの数を指定します。 *# of Jobs* が 2 以上のときは、ジョブが逐次実行され、各ジョブの最終構造が次のジョブの初期構造として使われます。

ワークフロー設定 ウィンドウの中央部では、各ジョブの計算条件を指定します。 *Details* をクリックすると、 **キーワード設定** ウィンドウが出現し、より詳細に計算条件を指定することができます。

最後に *OK* をクリックしてください。

(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** ）

  ジョブの設定 ウィンドウで、 **このマシンでジョブを実行** にチェックを入れ、 **実行** をクリックします。 **並列数** に使用する MPI プロセス数（ *# of MPI Procs* ）または 1 MPI プロセスあたりのスレッド数（ *# of Threads/MPI Proc* ）（MPI を使わない場合は総スレッド数）を入力します。パラメータ・構造スキャン機能では各計算の並列数を入力します。 *Winmostar Job Manager* が登録されたジョブを順番に処理します。

  実行後、 **プロジェクト表示エリア** で各作業フォルダの状態を確認します。正常に計算が進んだ場合、状態が NEW→PEND→RUN→END と変化します。異常があった場合、状態は ABORT となります。

  プロジェクト表示エリア で作業フォルダにカーソルを重ねるとエラーメッセージが表示されます。作業フォルダをクリックし **アクション** で *Log* をクリックすると計算のログを確認できます。

  ジョブを中止したい時は **プロジェクト表示エリア** の **作業フォルダ** で中止したいジョブを右クリックし、 *Stop* をクリックしてください。

- 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** ）

  ※ リモートジョブチュートリアル からも手順をご確認頂けます。

  ジョブの設定 ウィンドウで、 **リモートマシンでジョブを実行** にチェックを入れます。 **プロファイル** で使用したいサーバ設定を選択します。

  適切なプロファイルがない場合は、 *Config* をクリックし、サーバの情報を入力します。詳細は **ファイルモードにおけるリモートジョブの設定手順** を参照してください。

  リモートサーバ上でソルバを使用するために別途環境変数の指定が必要な場合は、 **テンプレートスクリプト** の *New* をクリックし、ジョブの投入時に使うシェルスクリプトを編集し **テンプレートスクリプト** で選択します。

  オプション にはリモートサーバ上でジョブをサブミットするコマンド（qsub など）の引数を入力します。典型的には使用したいキューの種類やマシン構成に依存したオプションが入力されます。この欄には **リモートジョブ機能で使用可能なエイリアス文字列** を使用し並列数などを抽象的に指定することができます。

  プロファイル や **オプション** の内容は *Test Connection* でテストすることができます。Test Connection の詳細は *Test Connection* **機能** で確認できます。また、空いているキューの確認などを *Control* で実行することができます。

  > **並列数** に使用する MPI プロセス数（ *# of MPI Procs* ）または 1 MPI プロセスあたりのスレッド数 （ *# of Threads/MPI Proc* ）（MPI を使わない場合は総ス

レッド数）を入力します。（パラメータ・構造スキャン機能では各計算の並列数を入力します。）

ジョブの説明 には実行して生成される作業フォルダの説明を記すことができます。この説明文は後から *Get Info* で修正することができます。

最後に **実行** をクリックします。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。

実行後、 **プロジェクト表示エリア** で各作業フォルダの状態を確認します。正常に計算が進んだ場合、状態が NEW→SEND→PEND→RUN→END(Rem)→RECV→END(-) と変化します。異常があった場合、状態は ABORT となります。ジョブの状態が正常に判定されなかった場合は *Recheck Status* を使用してください。

プロジェクト表示エリア で作業フォルダにカーソルを重ねるとエラーメッセージが表示されます。作業フォルダを右クリックし *Open Remote stdout* または *Open Remote stderr* をクリックすると、リモート上で実行された際の標準出力と標準エラーを確認することができます。作業フォルダをクリックし **アクション** で *Log* をクリックすると計算のログを確認できます。

状態が END(-) となりリモートサーバ上で正常終了した場合は、作業フォルダをクリックし **アクション** で *Receive All Remote Output Files* をクリックし、すべての出力ファイルをローカルマシンに転送します。

ジョブを中止したい時は **プロジェクト表示エリア** の **作業フォルダ** で中止したいジョブを右クリックし、 *Stop* をクリックしてください。

ジョブの実行中にログの末尾の確認や一部ファイルの取得・可視化を行いたい場合は、**プロジェクト表示エリア** の **作業フォルダ** で対象のジョブを右クリックし、 *Control Remote Job/Server* をクリックしてください。開いた *Control Remote Job/Server* ウィンドウの操作方法は *Submit Remote Job* **ウィンドウの各機能** を参照してください。

- Winmostar から直接計算を実行せず、ファイルだけを保存したい場合

  ジョブの設定 ウィンドウで、ローカルジョブやリモートジョブの時と同様に設定した上で、 **ファイルの保存後自部を実行しない** にチェックを入れ、右下の **保存** をクリックします。その後、 **ファイル** → **エクスプローラで表示** をクリックすると保存された入力ファイル、バッチファイル、シェルスクリプトの一式を確認することができます。後からジョブを実行したい場合は *Run* を使用してください。

- ジョブの実行だけ Winmostar を使わずに実行する場合

  ジョブの設定 ウィンドウで、ローカルジョブやリモートジョブの時と同様に設定した上で、 **ファイルの保存後自部を実行しない** にチェックを入れ、右下の **保存** をクリックします。その後、 **ファイル** → **エクスプローラで表示** をクリックすると保存された入力ファイル、バッチファイル、シェルスクリプトの一式を確認することができます。後からジョブを実行したい場合は *Run* を使用してください。

  1. 新規プロジェクトを作成し、通常通りモデリングをし、ワークフロー設定で計算条件を入力し *OK* をクリックします。例としてプロジェクト名は test とし、LAMMPS の 3 つのジョブ (minimize, NVT, NPT) を設定したとします。
  2. **ジョブの設定** ウィンドウで **ファイルの保存後ジョブを実行しない** にチェックを入れ **保存** をクリックします。
  3. **ファイル** → **エクスプローラで表示** をクリックすると 1 つ目の作業フォルダがエクスプローラで開くので、1 つ上の階層に移動し、wmpjdata フォルダ（今回の例では test.wmpjdata）に移動します。
  4. wmpjdata フォルダの名前（今回の例では test.wmpjdata）をメモします。

5. wmpj ファイルと今回生成された Exec フォルダと work*フォルダ（今回の例では test.wmpj, Exec1, work1_LMP_MIN, work2_LMP_NVT, work3_LMP_NPT）を圧縮します。スキャン計算では Exec フォルダが複数生成されます。work フォルダは連続ジョブ・スキャン計算において複数生成されます。
6. サーバー上に 4 でメモしたフォルダと同じ名前のディレクトリ（今回の例では test.wmpjdata）を作成します。
7. サーバーの 6 で作成したディレクトリ（今回の例では test.wmpjdata）に 5 で作成した圧縮ファイルを転送し解凍します。
8. サーバー上で 7 で解凍した Exec フォルダ（今回の例では Exec1）に移動し、run_seqjob.sh をジョブスケジューラにサブミットします。例えば qsub の場合は qsub run_seqjob.sh（適宜キューやコア数などのオプションは引数として与える必要があります）などと実行し、ジョブが完了するまで待ちます。
9. サーバー上で今回計算した Exec フォルダと work フォルダを圧縮し、ローカル PC の 3 のフォルダ（今回の例では test.wmpjdata）に転送します。
10. ローカル PC で 9 のファイルを解凍し、元からある Exec フォルダと work フォルダを置き換えます。
11. 作業フォルダの状態は NEW のままですが、通常通り結果解析を行います。

(5) 各種物理量の表示、解析

プロジェクト表示エリア で作業フォルダをクリックし **アクション** で表示または解析したい内容をクリックします。

(6) ジョブの延長、継続

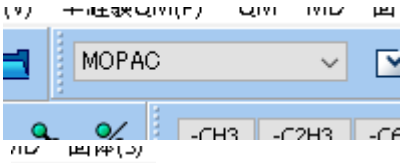
ジョブの延長や継続が必要な場合は、再度ワークフロー設定ボタンをクリックします。「ジョブを実行しますか？」と聞かれたら **はい** をクリックし、継続元の作業フォルダを選択し、新規ジョブと同様に計算条件の設定を計算の開始を行います。

4.2 ファイルモードの場合

(1) 初期構造を作成

ファイル → **新規ファイル** をクリックし、 **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

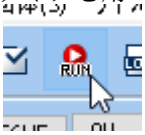
上部のツールバーの **ソルバ** プルダウンメニュー 

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** ）

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

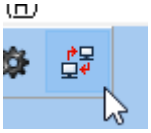
Run または **実行** をクリックした後、入力ファイルが保存されていない場合は入力ファイルの名前を入力すると保存され、続けて *Winmostar Job Manager* にジョブが登録されます。

Winmostar Job Manager は登録されたジョブを順番に処理します。

ジョブを中止したい時は、該当するコンソールウィンドウを閉じるか、該当するコンソールウィンドウがアクティブな状態で Ctrl-C を実行します。

- 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。設定方法は **ファイルモードにおけるリモートジョブの設定手順** を参照してください。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。

その他の細かい操作については **ファイルモードにおけるリモートジョブの操作手順** を参照してください。

ジョブを中止したい時は、 *Send & Submit* を実行した直後に表示されたジョブ ID を覚えておき、 *Submit Remote Job* ウィンドウの *Queue* → *Kill submitted job* をクリックし、ジョブ ID を入力します。

- Winmostar から直接計算を実行せず、ファイルだけを保存したい場合

Quantum ESPRESSO, LAMMPS, Gromacs の場合:

キーワード設定ウィンドウで *Options* タブに移動し、 *Dump all files for remote* ボタンを押し、ファイル名を入力して保存します。

それ以外のソルバの場合:

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、**ファイル** → **名前を付けて保存** をクリックし、ファイルを保存します。入力ファイルだけでなくシェルスクリプト等の付随するファイルも保存したい場合はプロジェクトモードを利用してください。

(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 を押して、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もあります。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ィンドウを開き、ジョブを開始します。

- MD については、キーワード設定ウィンドウで *Continue Simulation* にチェックを入れます。
- Quantum ESPRESSO については、キーワード設定ウィンドウで *Output Direcotory* 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ィ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。

- 構造式を **ファイル** → **インポート** → **構造式** で描画し読み込む。
- SMILES 形式の文字列を **ファイル** → **インポート** → *SMILES* から読み込む。
- 各種形式（PDB、mol、mol2、SDF、CIF、xyz など）のファイルを **ファイル** → **ファイルをインポート** またはメインウィンドウへのドラッグアンドドロップで読み込む。
- 3 次元の分子構造をメインウィンドウ上で直接モデリングする。

  編集 → **構造をリセット** で初期構造に戻り、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、 **編集** → **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** → **グループを軸回転（選択 *2* 原子）** 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** → **配座探索** *(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、 **ポリマーの作成** の方法を使う方が効率が良い。

5.2 点電荷の割り当て

MD 計算で必要な点電荷を Winmostar 上で設定する方法を紹介する。まず **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。

なお、水分子には力場割り当て時に選択した水モデルの電荷の値が無条件で適用されるため、明示的に電荷を設定する必要はない。

一部の原子の電荷をスケール、平均化またはシフトしたい場合は、 **選択メニュー** の方法で対象となる原子をグループ選択した後で、 **電荷/スピンを変更** 、 **グループの電荷を平均化** または **グループの電荷をシフト** を使用する。

- AM1/BCC 電荷または Gasteiger 電荷を割り当てる。

  MD → **手動で電荷を割り当て** → *AM1-BCC/Gasteiger* **電荷を使用** 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。

- RESP 電荷を自動で割り当てる。

  MD → **手動で電荷を割り当て** → *RESP* **電荷を使用** 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。

- GAMESS または Gaussian で RESP 電荷を手動で割り当てる。（プロジェクトモード）

  1. *QM* → *GAMESS/Gaussian* → **ワークフロー設定** をクリックする。現在表示されている構造で RESP 電荷を計算したい場合は *Preset* を 「RESP Charge」、構造最適化した後の構造で RESP 電荷を計算したい場合は *Preset* を「Optimize+RESP Charge」に変更する。イオンの場合は *Charge* に電荷を入力する。その後 *OK* をクリックする。
  2. **ジョブの設定** ウィンドウで適宜設定し **実行** ボタンをクリックする。
  3. GAMESS または Gaussian の計算が終了したら、メインウィンドウ左の **プロジェクト表示エリア** の **作業フォルダ** で最後の作業フォルダをクリックし、その下の **アクション** で *RESP Charge* をクリックする。いくつか質問に答えると RESP 電荷が割り当てられる。

- GAMESS または Gaussian で RESP 電荷を手動で割り当てる。（ファイルモード）

  1. *QM* → *GAMESS/Gaussian* → **キーワード設定** → *Easy Setup* にて、計算手法、基底関数を「HF/6-31G*」に設定し、 *Method* に *ESP/RESP* を選択する。イオンの場合は *Charge* に電荷を入力する。
  2. *Easy Setup* ウィンドウを *OK* ボタンで閉じ、 *GAMESS/Gaussian Setup* ウィンドウで *Run* ボタンを押し計算を実行する。
  3. GAMESS または Gaussian の計算が終了したら *QM* → *GAMESS/Gaussian* → **結果解析** → *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ィンドウに読み込む。
  - MOPAC の場合は **分子軌道**, **電荷** *(mgf)* 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ィンドウで開く。

- 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、 **編集** → **原子の属性を変更** → **電荷/スピンを変更** から電荷を入力する。

  - **編集** → **電荷を編集** から電荷を入力する。
- テキストファイル上で直接編集して割り当てる。
  - 一旦分子構造を **ファイル** → **名前を付けて保存** において mol2 形式で保存し、保存した mol2 ファイルを任意のテキストエディタで開き、 `@<TRIPOS>ATOM` から始まるセクションの 9 列目の値を編集する。編集後、 **ファイル** → **再度読み込み** をクリックし、編集後の構造を読み込む。
- 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、 **ポリマーの作成** 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. **編集** → **セルを作成/編集** → **セルを作成** にてセルを作成する。

5.4 分子クラスタ（2 量体, 3 量体...）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. 1. の手順で作成した分子を複製したい場合は、複製したい分子を Shift ＋クリックでグループ選択した後に、 **編集** → **グループ編集** → **グループをコピー** でコピーしてから **編集** → **グループ編集** → **グループを貼り付け** でペーストする。ペーストした分子を回転したいときは **編集** → **グループ編集** → **グループを回転（マウス操作）** , **グループを回転（数値を指定）** , **グループを回転（配向を指定）** を実行する。
3. すでに分子構造ファイルとして保存された分子を追加したい場合は、 **ファイル** → **ファイルをインポート** を実行する。ファイルを選択した後で **追加読み込み** をクリックする。追加した分子を移動させたい場合は **編集** → **グループ編集** → **グループを並進移動（マウス操作）** , **グループを並進移動（数値を指定）** を実行し、回転したいときは **編集** → **グループ編集** → **グループを回転（マウス操作）** , **グループを回転（数値を指定）** , **グループを回転（配向を指定）** を実行する。
4. 直接新しい分子をモデリングしたい場合は、 **編集** → **原子を追加** → **座標を指定** を実行し、新しい分子を追加したい位置をクリックする。そして、追加された原子に対し **編集** → **フラグメントで置換** などの **分子構造の作成** の手順を実行する。

5.5 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. **ファイル** → **ファイルをエクスポート** から mol2 または wmm 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. *MD* → **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。メインウィ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 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* ウィンドウ下部の *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、低い密度（目的の物質あるいは目的の物質に類似する物質の実験値が分かっている場合は、その値の 40 %程度）から始め、 **編集** → **セルを作成/編集** → **セルを変形** で密度を調整するか、MD 計算を実行し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。
- *CygwinWM* 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** → **グループを複製** 、 **セルを作成** 、 **ファイルをインポート** を組み合わせることでも作成可能です。

5.6 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を作成する。例えば、ポリエチレンの場合はエチレン分子ではなくエタン分子を作成する。
2. MD 計算の場合は、繰り返し単位の状態で **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、隣の繰り返し単位と接続する原子を 2 か所左クリックし、 *MD* → **ポリマー** → **繰り返し単位登録** の方法で繰り返し単位として登録する。
4. 作成したいポリマーの構造に応じて、*MD* → **ポリマー** → **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。

Tip:

- 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 **繰り返し単位登録** にて繰り返し単位として登録し **ホモポリマービルダ** を使用する。

---

5. *MD* → **ポリマー** → **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、 **分子構造の作成** と **点電荷の割り当て** の手順で溶解している低分子を作成しあらかじめ mol2 形式で保存しておく。そして、5. の手順の後で保存した低分子成分の mol2 ファイルを *MD* → **分子を挿入** にて選択し挿入する。5. の手順において密度を低めに設定しないと低分子成分の挿入に失敗することがある。

5.7 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. **編集** → **セルを変形** にて *Transform only along the selected axis* と *Do not change* にチェックを入れ、 *Set incremental length* または *Set total length* にチェックを入れ、値を入力した後 *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 **編集** → **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。

5.8 液液界面の作成

1. **低分子液体の作成** の方法で片方の液相を作成する。この時、予め 2 つの相に含まれる全ての種類の分子について mol2 ファイルを作成しておく。
2. **ファイル** → **ファイルをエクスポート** から mol2 形式で保存する。
3. *MD* → **溶媒を配置/セルを構築** を選択する。
4. もう片方の相にどの分子を何分子入れるか決める。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 File* をクリックし mol2 ファイルを選択する。
5. 系内に投入する個数を入力する。
6. 4.、5. の手順を計算したい全ての分子種に対して行う。
7. *Simulatoin Cell* タブで *Set Lattice Constants* にチェックを入れ、 *Same as main window* ボタンをクリックする。次に、 *Box Type* で「triclinic」を選択する。 *Set Lattice Constants* の右に、最初に作成した相のセルサイズが表示される。 *Change only one direction* をクリックし、*Select direction* で Z を選択し、*Enter density* で指定密度を入力すると、x, y 方向の格子定数は固定したまま z 方向の格子定数が自動で設定される。
8. *Build* ボタンを押す。
9. **ファイル** → **ファイルをエクスポート** から mol2 形式で保存する。
10. *MD* → **界面ビルダ** をクリックする。
11. *Cell* タブの *Cell 1* の *Browse* ボタンをクリックし、2. で保存したファイルを選択する。同様に、 *Cell 2* においては、9. で保存したファイルを選択する。
12. *Direction* タブの *Interval* に液相間の距離を入力する。
13. *Build* ボタンをクリックする。

5.9 タンパク質の作成（リガンドなし）

1. 計算したいタンパク質の pdb ファイルを Winmostar で開く。
2. **選択** → **分子種によるグループ選択** の手順でタンパク以外の成分（結合水、緩衝剤、リガンドなど）をグループ選択してから、**編集** → **グループ編集** → **グループを削除** の手順で選択グループを削除する。
3. **編集** → **水素を付加** → *pdb2gmx* **を使用** を実行する。実行前の状態で水素が付加されているように見える場合も、この処理を省略すると後ほど計算に失敗することがある。
4. *MD* → **溶媒を配置/セルを構築** をクリックする。 *Add Displayed Molecule* をクリックし、 *Enter # of molecules* で「1」と入力し *OK* ボタンをクリックする。 次に *Add Water* ボタンをクリックし、 *Enter # of molecules* で適当な分子数（5000〜10000 程度）を入力し、 *OK* ボタンをクリックする。その後、 *Build* ボタンをクリックする。
5. 系を中性化するために *MD* → **水をイオンに置換** の手順でイオンを配置する。「WARNING: The charges defined on the main window will be discarded. Are you sure you want to continue?」と表示されたら **はい** をクリックする。

なお、この後 MD 計算を実行する場合は、上記手順を実行した後ファイルを保存すると、残基情報などが適切に保存されないことがあるため、上記手順を実行後続けて MD 計算を実行することが望ましい。

5.10 タンパク質の作成（リガンドあり）

1. 計算したいタンパク質-リガンド複合体の pdb ファイルを Winmostar で開く。
2. **選択** → **分子種によるグループ選択** の手順でリガンド以外の成分（タンパク、結合水、緩衝剤など）をグループ選択してから、**編集** → **グループを削除** の手順で選択グループを削除する。
3. **編集** → **水素を付加** → *OpenBabel* **を使用** を実行する。
4. **ファイル** → **ファイルをエクスポート** にてリガンドの構造を mol2 形式で保存する。
5. 再び計算したいタンパク質-リガンド複合体の pdb ファイルを Winmostar で開く。
6. **選択** → **分子種によるグループ選択** の手順でタンパク以外の成分（結合水、緩衝剤、リガンドなど）をグループ選択してから、**編集** → **グループ編集** → **グループを削除** の手順で選択グループを削除する。
7. **編集** → **水素を付加** → *pdb2gmx* **を使用** を実行する。実行前の状態で水素が付加されているように見える場合も、この処理を省略すると後ほど計算に失敗することがある。
8. **溶媒を配置/セルを構築** をクリックする。 *Add Displayed Molecule* をクリックし、 *Enter # of molecules* で「1」と入力し *OK* ボタンをクリックする。 次に *Add Water* ボタンをクリックし、 *Enter # of molecules* で適当な分子数（5000〜10000 程度）を入力し、 *OK* ボタンをクリックする。そして、 *Add mol2 File* ボタンをクリックし、4. で保存した mol2 ファイルを開き、 *Enter # of molecules* で「1」と入力し、 *OK* ボタンをクリックする。「この分子を乱数的に配置しますか？」と聞かれたら **いいえ** をクリックする。その後、 *Build* ボタンをクリックする。
9. 系を中性化するために *MD* → **水をイオンに置換** の手順でイオンを配置する。「WARNING: The charges defined on the main window will be discarded. Are you sure you want to continue?」と表示されたら **はい** をクリックする。

なお、この後 MD 計算を実行する場合は、上記手順を実行した後ファイルを保存すると、残基情報などが適切に保存されないことがあるため、上記手順を実行後続けて MD 計算を実行することが望ましい。

5.11 無機結晶の作成

CIF ファイルなどで計算したい結晶のデータを既に持っている場合は、Winmostar でそのファイルを開く。そのようなファイルがない場合は、以下の操作を行う。

1. **固体** → **結晶ビルダ** をクリックする。
2. *Crystal Builder* ウィンドウ右上の以下の項目を選択する。
   - *Lattice* の *Crystal System* から計算したい結晶の分類を選択する。
   - *Lattice* の *Space Group* から計算したい結晶の空間群を選択する。 *Space Group* の選択肢は *Crystal System* によって変化する。
   - *Lattice Constants* に計算したい結晶の格子定数を入力する。
3. *Crystal Builder* ウィンドウ右下のリストに、非対称要素の原子を入力する。
   - *Atom* の欄をダブルクリックし元素の種類を入力する。
   - *X* , *Y* , *Z* の欄をダブルクリックし座標を記入する。
   - *Add* ボタンで原子を追加する。
   - *Remove* ボタンでリスト中で選択された原子を削除する。
4. *OK* ボタンをクリックして、結晶ビルダで指定した構造をメインウィンドウに反映する。
5. 結晶にひずみを与える場合は、 **編集** → **セルを作成/編集** → **セルを変形** 機能を使用する。
6. 結晶構造は変えずに結晶の単位格子を変更したい場合は、次の操作を実行する。プリミティブセルとコンベンショナルセルの間で変換したい場合は **固体** → **格子を変換** *(Primitive-Conventional)* 機能を使用する。六方晶セルを直方体セルに変換したい場合は **固体** → **格子を等価な直方体セルに変換** 機能を使用する。回転行列を指定して単位格子を変換したい場合は **固体** → **単位格子を変換** 機能を使用する。
7. 作成した構造あるいは読み込ませたファイルの構造において対称性が本来のものから崩れている場合は、 **固体** → **対称性を考慮して結晶構造を調整** 機能を使用すると対称性が改善することがある。

5.12 無機結晶の作成（点欠陥または元素置換あり）

1. 欠陥がない状態の結晶の CIF ファイルを開くか、 **無機結晶の作成** の方法で結晶構造を作成する。
2. **固体** → **スーパーセルを作成** をクリックする。 *a* , *b* , *c* の値を大きくし、スーパーセルのサイズを指定する（まずは各方向 2 程度）。最後に *OK* ボタンをクリックする。
3. メインウィンドウにおいて、点欠陥を作りたい箇所の原子または、元素を置換したい原子を左クリックし赤いマーカーが付いた状態にする。
4. 点欠陥を作りたい場合は、 **編集** → **原子を削除** をクリックする。
5. 元素を置換したい場合は、 **編集** → **編集操作向けの元素を選択** から変更後の元素を選択し、その後 **編集** → **属性を変更** → **元素を変更** をクリックする。

5.13 無機スラブ（表面）の作成

1. バルクの状態の結晶の CIF ファイルを開くか、 **無機結晶の作成** の方法で結晶構造を作成する。
2. **固体** → **スラブを作成** をクリックする。
3. *Miller indices (h k l)* など *Slab Builder* ウィンドウ内の設定を調整する。表面を修飾したい場合（例えば酸化物表面を OH 基で修飾するなど）は、 *Terminate dangling bonds with hydrogen* にチェックを入れる（後で水素を官能基に置換する）。そして *OK* をクリックする。
4. 構造は変えずにセルの取り方を変更したい場合は、次の操作を実行する。（例えば、固固界面を作成したいが片方の ab 平面の形状がもう片方の ab 平面の形状と異なる場合など）六方晶セルを直方体セルに変換したい場合は **固体** → **格子を等価な直方体セルに変換** 機能を使用する。回転行列を指定して単位格子を変換したい場合は **固体** → **単位格子を変換** 機能を使用する。
5. 作成した構造において対称性が本来のものから崩れている場合は、 **固体** → **対称性を考慮して結晶構造を調整** 機能を使用すると対称性が改善することがある。
6. 表面を修飾する場合は、修飾したい表面の水素をグループ選択（ **選択メニュー** ）し、ツールバーの **フラグメント** で修飾したい官能基を選択してから *Replace* をクリックします。不要な表面の水素はグループ選択（ **選択メニュー** ）してから **グループを削除** で削除します。

5.14 分子吸着表面の作成

1. **分子構造の作成** の方法で吸着させる分子を作成する。
2. **ファイル** → **ファイルをエクスポート** から wmm または mol2 形式で保存する。
3. **無機スラブ（表面）の作成** の方法で表面を作成する。
4. 必要に応じて、 **固体** → **スーパーセルを作成** をクリックする。 *a* , *b* の値を大きくし、スーパーセルのサイズを指定する。最後に *OK* ボタンをクリックする。
5. スラブ表面上で分子を吸着させたい位置の直下の原子をクリック（マーク）し、 **編集** → **原子を追加** → **ダミー原子を指定距離に追加** をクリックする。Axis は z にし、Distance を適当に設定し OK をクリックする。
6. *MD* → **分子を置換** をクリックする。Species=(unknown) をクリックし OK をクリックする。そして、2 でエクスポートしたファイルを開く。
7. 吸着分子を回転させたい場合は **編集** → **グループ編集** → **グループを回転（配向を指定）** や **グループを回転（数値を指定）** を使用する。吸着分子を並進移動させたい場合は **編集** → **グループ編集** → **グループを並進移動（数値を指定）** を使用する。例えば表面第一層と吸着分子内の特定原子の間の距離を調整したい場合は、まず表面第一層の原子をクリックし、次に吸着分子内の特定原子をクリックし、吸着分子を Ctrl+クリックしてグループ選択します。そして **編集** → **グループ編集** → **グループを並進移動（数値を指定）** をクリックし、 *Definition* を Relative coordinate between marked atoms に変更し、 *Z* の値を変更します。

5.15 固固界面（粒界）の作成

1. **無機スラブ（表面）の作成** の方法で片方の固体を作成する。
2. **ファイル** → **ファイルをエクスポート** から cif 形式で保存する。
3. **無機スラブ（表面）の作成** の方法でもう片方の固体を作成する。ここで、ab 平面の形状が 1 で作成した構造の ab 平面の形状と異なる場合は、 **固体** → **単位格子を変換** 機能を使用してセルを取り直す。
4. **ファイル** → **ファイルをエクスポート** から cif 形式で保存する。
5. *MD* → **界面ビルダ** をクリックする。
6. *Cell* タブの *Cell 1* の *Browse* ボタンをクリックし、3. で保存したファイルを選択する。同様に、 *Cell 2* においては、5. で保存したファイルを選択する。
7. *Direction* タブの *Interval* に固体間の距離を入力する。また、 *Interval* の *Specify interval on selected axis between outermost atoms* にチェックを入れる。
8. *Repeat* タブに移動すると、3 つの *Suggest* ボタンのうち、上ふたつ（a-axis と b-axis）が押せる状態になっている。この *Suggest* ボタンをクリックし、 *Ratio* の値（Cell1 と Cell2 のセルサイズ比率）が 1 に近く、かつシステムサイズが大きすぎない行を選択し、 *Set* ボタンをクリックする。
9. *Build* ボタンをクリックする。
10. Ctrl+左ドラッグなどにより、片方の固体をグループ選択する。詳細は **選択メニュー** を参照する。
11. **編集** → **グループ編集** → **グループを並進移動（数値を指定）** をクリックし、X, Y 方向にグループを並進移動させる。 **表示** → **三面図を表示** を有効にすると位置の確認をしやすくなる。

5.16 固液界面の作成

1. 液相側について、 **低分子液体の作成** の 1 から 4 までの操作を実行する。
2. **無機スラブ（表面）の作成** の方法で固体表面を作成する。
3. **固体** → **スーパーセルを作成** をクリックし、a, b 軸方向のサイズを最終的に作成したい固液界面系の a, b 軸方向のサイズに調整し *OK* をクリックする。
4. **ファイル** → **ファイルをエクスポート** から mol2 形式で保存する。
5. *MD* → **溶媒を配置/セルを構築** を選択する。
6. 液相にどの分子を何分子入れるか決める。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 File* をクリックし 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. *Simulatoin Cell* タブで *Set Lattice Constants* にチェックを入れ、 *Same as main window* ボタンをクリックする。次に、 *Box Type* で「triclinic」を選択する。 *Set Lattice Constants* の右に、最初に作成した相のセルサイズが表示される。 *Change only one direction* をクリックし、*Select direction* で Z を選択し、*Enter density* で指定密度を入力すると、x, y 方向の格子定数は固定したまま z 方向の格子定数が自動で設定される。
10. *Build* ボタンを押す。
11. **ファイル** → **ファイルをエクスポート** から mol2 形式で保存する。
12. *MD* → **界面ビルダ** をクリックする。

13. *Cell* タブの *Cell 1* の *Browse* ボタンをクリックし、4. で保存したファイルを選択する。同様に、 *Cell 2* においては、11. で保存したファイルを選択する。
14. *Direction* タブの *Interval* に固体-液体間の距離を入力する。
15. *Build* ボタンをクリックする。
16. *MD* → **界面ビルダ** をクリックする。
17. *Cell* タブの *Cell 1* は *Use displayed cell* にチェックを入れる。 *Cell 2* においては、4. で保存したファイルを選択する。
18. *Direction* タブの *Interval* に固体-液体間の距離を入力する。
19. *Build* ボタンをクリックする。

5.17 分子結晶の作成

現時点で Winmostar 上で単分子の構造から物理化学的に妥当な分子結晶の安定構造を生成する機能はないため、データベース等から取得した分子結晶の構造ファイルを起点とする必要がある。また、そのような構造ファイルではシミュレーションセルの境界をまたぐ分子の座標が離れており、そのような構造ファイルを直接使用して Gromacs, LAMMPS など分子動力学計算のための力場の割り当てを実行すると処理に失敗する。ここでは、力場の割り当てが失敗しないための処理方法を以下に紹介する。なお、Quantum ESPRESSO や OpenMX など第一原理計算のみ実施する場合、以下の処理は不要である。

1. 分子結晶の構造ファイル（CIF など）を **ファイル** → **ファイルをインポート** から読み込む。
2. **編集** → **周期境界に基づき原子を再配置** で **原子単位で再配置された構造をもとに戻す** にチェックを入れ *OK* をクリックする。

Chapter 6

各メニュー・ウィンドウの詳細

6.1 ファイル メニュー

6.1.1 新規プロジェクト

新規にプロジェクトを作成します。

作成したプロジェクトのファイル構成は以下の通りです。

各ファイル・フォルダのリネームには対応していません。プロジェクトのリネームに対応していないため、プロジェクトの役割などのメモを **ファイル** → **プロジェクト** → **情報を見る** の Description に記載することをお勧めします。作業フォルダについても同様に **ファイル** → **プロジェクト** → **選択された作業フォルダ** → *Get Info* の Description にメモを残すことができます。

プロジェクトのファイルを移動する際には、wmpjdata フォルダごと移動してください。

- `.wmpjdata` フォルダ: 当該プロジェクトに含まれるすべてのファイルを含むフォルダです。このフォルダを Winmostar にドラッグアンドドロップするとプロジェクトが開かれます。
- `.wmpj` ファイル: 当該プロジェクトに関する情報が書かれたファイルです。このファイルを Winmostar にドラッグアンドドロップするとプロジェクトが開かれます。
- `temp.wmm` : 編集中の分子構造の情報が書かれたファイルです。
- `index.ndx` : **選択** → **グループを登録** で登録したグループの情報が保存されるファイルです。
- `.wmps*` ファイル: このプロジェクトで使用したワークフローの設定ファイルです。
- `work*` フォルダ: 作業フォルダです。
- `Exec*` フォルダ: 各作業フォルダのジョブを制御するファイルが収められたフォルダです。

6.1.2 現在の構造で新規プロジェクト

現在分子表示エリアに表示されている構造を用いて新規プロジェクトを作成します。

6.1.3 プロジェクトを開く

既存のプロジェクトを開きます。

6.1.4 最近使ったプロジェクトを開く

最近開かれたプロジェクトを開きます。

履歴をクリア

最近開かれたプロジェクトの履歴を空にします。

6.1.5 プロジェクト

情報を見る

開かれているプロジェクトの情報を見ます。一部情報はここで編集できます。

一時ファイルを開く

開かれているプロジェクトの一時ファイルを開きます。

エクスプローラで表示

開かれているプロジェクトの wmpjdata フォルダを開きます。

パラメータ/構造スキャン結果表示

複数の作業フォルダの計算結果を集計することができます。パラメータ/構造スキャンの結果可視化に有用です。

Check All
Working Folders のすべての作業フォルダにチェックを入れます。

Uncheck All
Working Folders のすべての作業フォルダのチェックを外します。

Check Selected
Working Folders で選択されている作業フォルダにチェックを入れます。Working Folders では Shift または Ctrl で作業フォルダを複数選択することができます。

Working Folders
可視化したい計算結果を含む作業フォルダにチェックを入れてください。

X Axis
可視化する際の X 軸の値を選択します。Input Parameter（一部のソルバのみ対応）の場合は、キーワード設定ウィンドウ（プロジェクトモードの場合はワークフロー設定ウィンドウの Details）で設定する入力パラメータを、項目名または Winmostar 内部パラメータのリストから選択できます。Boltzmann Population（一部のソルバのみ対応）は total energy を元に算出されます。Normal strain, Shear strain（一部のソルバのみ対応）は **構造スキャン** で与えたひずみとなります。

Y Axis
可視化する際の Y 軸の値を選択します。X Axis と同じ項目を選択できます。

Options

Export csv
各作業フォルダについて物性を羅列した csv ファイルを出力します。グラフから csv ファイルを出力する場合は物性を 1 種類しか選べませんが、本機能を利用すると複数の物性を出力することができます。

Export Animation
終構造と Property で選択した値を含む wmm ファイルを作成します。例えば体積-全エネルギーグラフを作成したい場合は、この機能でアニメーションを作成してから Custom Plot 機能で X 軸に Volume を選択します。

Interpolate Structure at Specified Volume
体積を変えた構造をスキャンした際に、指定した体積での構造を内挿します。

Draw
設定した条件でグラフを作成します。LAMMPS, Gromacs の熱力学量をプロットする際には標準誤差がエラーバーで表示されます。

複数のジョブを一括で停止

プロジェクト中で実行中のジョブを一括で選択して停止します。

選択された作業フォルダ

本メニューの各機能はメインウィンドウ左のプロジェクト表示エリアにおける **作業フォルダ** で選択された作業フォルダに対して動作します。

プロジェクト表示エリアの **作業フォルダ** を右クリックしても同じメニューが表示されます。

Open Coordinate (Initial)

選択された作業フォルダ内の初期構造を表示します。多くの場合はジョブの入力ファイルになります。

連続生成された作業フォルダの 2 番目以降に実行される作業フォルダについては、ジョブが実行されるまでは 1 番目に実行される作業フォルダと同じ初期構造が表示されます。ジョブの実行後は、その作業フォルダの本来の初期構造が表示されます。

Run

選択された作業フォルダのジョブを実行します。 **ジョブの設定** ウィンドウで **ファイルの保存後ジョブを実行しない** を選択し、後でジョブを開始したい場合は本機能を使います。

Stop

選択された作業フォルダのジョブを停止（強制終了）します。

Show Workflow Setup

選択された作業フォルダに関するワークフロー設定を表示します。

Show Keyword Setup

選択された作業フォルダに関するキーワード設定を表示します。ワークフロー設定における Details の内容に相当します。

Show Job Setting

選択された作業フォルダに関するジョブの設定を表示します。

Control Remote Job/Server

選択された作業フォルダのジョブについてリモートサーバの操作を行います。リモートジョブの場合のみ使用できます。

Show Command for Job Submission

選択された作業フォルダのジョブをリモートサーバで投入（submit）した際のコマンドを表示します。リモートジョブの場合のみ使用できます。

Show Result of Job Submission

選択された作業フォルダのジョブをリモートサーバで投入（submit）した際の結果を表示します。リモートジョブの場合のみ使用できます。

Receive All Remote Output Files

選択された作業フォルダのジョブに関する全ての出力ファイルをリモートサーバからローカルマシンに転送します。正常終了したジョブの場合はジョブの最後で自動的に生成された zip ファイルを取得します。正常終了していないジョブの場合はこの操作を行うタイミングで zip ファイルを作成し取得します。リモートジョブの場合のみ使用できます。

Open Remote stdout

選択された作業フォルダのジョブに関するリモートサーバ上での標準出力を開きます。リモートジョブの場合のみ使用できます。

Open Remote stderr

選択された作業フォルダのジョブに関するリモートサーバ上での標準エラーを開きます。リモートジョブの場合のみ使用できます。

Delete Remote Working Folder

リモートサーバ上での選択された作業フォルダのデータを削除します。この操作は戻すことができません。リモートジョブの場合のみ使用できます。

Get Info

選択された作業フォルダの Description を変更することができます。Description は **ジョブの設定** ウィンドウの **ジョブの説明** で設定した文字列になります。

Recheck Status

選択された作業フォルダの状態を再チェックします。リモートジョブで何らかの理由により正常に状態が判定されない場合は（例えば、正常終了しているにも関わらず ABORT と表示される場合など）、本機能を利用すると状態が再判定されます。

Delete

選択された作業フォルダを削除します。この操作は戻すことができません。

Show in Explorer

選択された作業フォルダをエクスプローラで表示します。

6.1.6 新規ファイル

新規にファイルを作成します。

ヒント: Ctrl+N でも操作できます。

6.1.7 ファイルを開く

ファイルから分子構造をメインウィ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。

現在のモード・ファイルを切り替えることなく構造を読み込みたい場合は **ファイルをインポート** を使ってください。

ヒント: Ctrl+O でも操作できます。

6.1.8 最近使ったファイルを開く

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。

6.1.9 再度読み込み

メインウィンドウで開かれているファイルを再度読み込みます。

6.1.10 上書き保存

現在開いているファイルまたはプロジェクト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。

6.1.11 名前を付けて保存

メインウィンドウに表示されている分子構造を別名で保存します。

保存後、保存したファイルが開き直されます。開き直すことなく単に構造を指定したフォーマットで出力したい場合は **ファイルをエクスポート** を使ってください。

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。

複数種類の電荷が同時に設定されていて（例えば、Mulliken 電荷と Lowdin 電荷など）、単一種類の電荷情報を含むファイル形式（例えば mol2）で保存する場合は、優先度の高い種類の電荷が出力されます。優先度は User 電荷が最も高く、続いて NBO 電荷、Mulliken 電荷、Lowdin 電荷となり、最も優先度が低いのは ESP 電荷です。複数種類の電荷が同時に設定されていて、その中でも優先度の低い電荷を出力したい場合は、 **電荷を編集** を利用して優先度の高い電荷の情報を削除します。

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、キーワード設定ウィ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** → **座標表示形式を切り替え** 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。

6.1.12 閉じる

現在開いているプロジェクトまたはファイルを閉じ、起動直後の画面に戻ります。

6.1.13 ファイルをインポート

既存の分子構造ファイルを読み込みます。現在の構造を破棄して読み込むか、現在の構造に追加して読み込むことができます。

ファイルを開く ではファイルを読み込んだ時点でファイルモードでファイルが開かれますが、本機能を使うとモードやファイルを切り替えることなく分子表示エリアの構造をインポートしたファイルの構造で上書きします。

6.1.14 最近使ったファイルをインポート

最近使ったファイルをインポートします。

6.1.15 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、メインウィンドウに読み込みます。 *Import SMILES* ウィンドウが開いたら、 *Enter SMILES* の欄に SMILES 形式の文字列を入力し、 *Import* を押してください。内部的には Balloon または OpenBabel が使用されます。`*_smiles_tmp` という作業フォルダに中間ファイルが生成されます。

構造式

構造式を入力することにより分子を作成します。内部では JSME で構造式を描画し、JSME から SMILES を生成して Balloon または OpenBabel が 3 次元構造を生成します。

Samples ファイル

Samples フォルダの中のファイルを読み込みます。

6.1.16 ファイルをエクスポート

任意のファイル形式で現在の分子構造を出力します。ファイル出力時の細かい挙動は **名前を付けて保存** に準じます。

6.1.17 エクスポート

選択した形式でメインウィンドウに表示されている内容を出力します。

SMILES

メインウィ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。メインウィ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。「水素原子を補完してから SMILES を生成しますか？」のダイアログで「はい」の場合は OpenBabel を-b オプション付きで mol2 形式経由で実行し、「いいえ」の場合は xyz 形式経由で実行します。

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

構造式

メインウィ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。メインウィ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 *CygwinWM* **のセットアップ** が必要です。

画像

メインウィ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。

CHARMM crd File

メインウィンドウに表示されている分子構造を CHARMM の crd 形式で出力します。

LAMMPS data File (for metal)

メインウィンドウに表示されている分子構造を LAMMPS の data 形式（read_data コマンドで読めるファイル）で出力します。units=metal での書式となります。各種のポテンシャルファイルで力場を設定とすることを前提とした data ファイルを生成します。

SDF 形式

メインウィンドウに表示されている分子構造を SDF 形式で出力します。

6.1.18 情報を見る

メインウィンドウに表示されている分子構造の詳細情報を表示します。

6.1.19 テキストエディタで開く

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

6.1.20 エクスプローラで表示

メインウィ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。

6.1.21 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, マウス操作）** 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 テキストを戻す

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 構造をリセット

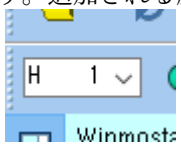
新規プロジェクト または **新規ファイル** をクリックした際の初期構造に戻ります。

6.2.5 編集操作向けの元素を選択

原子を追加 や **元素を変更** で適用される元素を選択します。

6.2.6 原子を追加

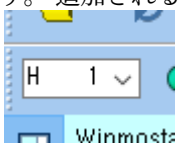
座標を指定

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** からも操作できます。

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 

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。

ダミー原子を指定距離に追加

マーカー（赤太丸）が付いた原子から指定距離離れた位置にダミー原子を追加します。追加する方向（軸）を選択することができます。

ダミー原子を選択 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。

ダミー原子を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。

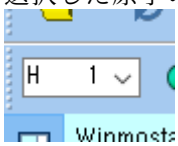
6.2.7 原子を削除

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。

6.2.8 原子の属性を変更

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


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。

最適化フラグとは、構造最適化計算において各自由度を固定するか（フラグが「0」）、または可変（フラグが「1」）にするかを指定するフラグです。デフォルトでは全自由度が可変（1）になっています。

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。 *Overwrite* をチェックした場合は、選択した原子の全ての値が入力値に上書きされます。 *Scale* をチェックした場合は、選択した原子の全ての値が等倍されます。

注釈: User Charge または Spin Density をメインウィ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。

占有率を変更

マーカーが付いた原子の置かれたサイトまたは、グループ選択された原子の置かれたサイトの占有率（Occupancy）を変更します。 *Occupancy* の合計値は 1 である必要があります。

1 以外の占有率が設定されているサイトには、複数の原子が存在しているように Winmostar 上で扱われます。Occupancy が設定された CIF ファイルを読み込んだ際の挙動も同様です。

原子名を変更

マーカーが付いた原子の置かれたサイトまたは、グループ選択された原子の原子名を変更します。PDB, mol2, gro 形式で読み書きする際に影響します。

残基名を変更

マーカーが付いた原子の置かれたサイトまたは、グループ選択された原子の残基名を変更します。PDB, mol2, gro 形式で読み書きする際に影響します。

残基番号を変更

マーカーが付いた原子の置かれたサイトまたは、グループ選択された原子の残基番号を変更します。PDB, mol2, gro 形式で読み書きする際に影響します。

6.2.9 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。

並進移動 (水素付き)

マーカー が付いた原子とそこに結合する水素を **分子表示エリア** 上でドラッグして移動します。

ヒント: Ctrl+F5 または Alt +ドラッグでも操作できます。

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。

分率座標を変更

マーカー が付いた原子の分率座標 (fractional coordinate) を指定します。

6.2.10 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）、補助の 5 つが定義されています。補助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。補助結合の表示（破線、実線、色）は **ツール** → **環境設定 メニュー** で調整することができます。

ヒント: F7 または **ツールバー** でも操作できます。

6.2.11 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。

6.2.12 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。グループ選択されている場合はその原子のみ水素を付加します。

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付加します。グループ選択されている場合はその原子に水素を付加します。

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。グループ選択されている場合はその原子に水素を付加します。

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: メインウィ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 *CygwinWM* **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: メインウィ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 *CygwinWM* **のセットアップ** が必要です。

6.2.13 すべての水素を削除

全ての水素原子を削除します。

6.2.14 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**

で選ばれた部品（置換基）で置換します。**フラグメント** 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。グループ選択されている場合はグループ選択された各原子が置換されます。

フラグメントの登録、削除は **フラグメントを登録** と **フラグメントを削除** から行います。

ヒント: F6 、 *Replace* ボタン、または原子を右クリックでも操作できます。

6.2.15 フラグメントを選択

フラグメントで置換 で置換されるフラグメントを選択します。

フラグメントの並び順はユーザ設定フォルダ (UserPref) の fragment_list.txt で変更できます。

フラグメントを登録

メインウィンドウに表示されている分子構造をフラグメントとして登録します。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** で選ばれたフラグメントの登録を削除します。

6.2.16 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、本機能を呼び出すと、ナフタレン分子が作成されます。

6.2.17 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, マウス操作）

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マウス操作で回転させます。

ヒント: Ctrl+R でも操作できます。

グループを軸回転（選択 2 原子, 数値を指定）

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数値を指定して回転させます。

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（数値を指定）

グループ選択された構造を、 **マーカー（赤太丸）** が付いた原子または幾何中心を中心に、スライダー操作まはた数値入力により回転させます。指定するのはオイラー角です。

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。

Align principle axis to target direction
慣性主軸の長軸が指定方向に向くよう回転させます。

Align 2 marked atoms to target direction
マーカーが付けられた 2 原子が指定軸を向くよう回転させます。マーカーが付けられた 2 原子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。

Align 3 marked atoms to target plane
マーカーが付けられた 3 原子が指定面に含まれるよう回転させます。マーカーが付けられた 3 原子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。

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。

- Definition = Relative coordinate from original position の場合: 移動前の位置からの相対座標を指定します。
- Definition = Relative coordinate between marked atoms の場合: 2 つのマークされた原子の間の相対座標を指定します。本機能を起動する前にあらかじめ、まず移動対象となる原子群に含まれない原点となる原子をクリック（マーク）して、次に原点となる原子からの相対位置を指定したい原子でかつ移動対象となる原子群に含まれる原子をクリック（マーク）し、その後移動対象となる原子群をグループ選択しておく必要があります。
- Definition = Absolute coordinate for center of mass の場合: グループの重心に対する絶対座標を指定します。
- Definition = Absolute coordinate for center of geometry の場合: グループの幾何中心に対する絶対座標を指定します。Direction では動かす方向を指定します。Two marked atoms の場合は、直前にクリックした 2 つのマークした原子の間のベクトルが方向として使われます。

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。

グループ内の隣接原子間に結合を生成

グループ選択された構造中の隣接原子間で結合を自動生成します。ボロノイ分割により隣接が判定されます。

ヒント: Ctrl+L でも操作できます。

グループ内の結合を削除

グループ選択された構造中の結合を削除します。グループ選択されていない原子とグループ選択されている原子の間の結合は削除しません。

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 XYZ 座標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。最適化フラグの詳細は **最適化フラグを変更** を参照してください。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。

グループを固定/固定解除 (Z-Matrix)

グループ選択された構造の Z-Matrix 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。最適化フラグの詳細は **最適化フラグを変更** を参照してください。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。

グループの電荷をシフト

グループ選択された構造の持つ点電荷の合計値を、指定した値に一様にシフトします。MD 計算実行時など、系全体の電荷を 0 にしたいときに便利な機能です。

グループの電荷を平均化

グループ選択された構造の持つ点電荷の合計値を、それらの平均値に修正します。 *RESP* **電荷を使用** や *RESP* **電荷** の実行後、等価な原子（例えばメチル基の 3 つの水素原子）の電荷を平均化したい時などに便利な機能です。

6.2.18 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。

使用するアルゴリズムは **ツール** → **環境設定 メニュー** で変更できます。

方法が「Winmostar」の場合は V10 以前の Winmostar で使われているアルゴリズムが使用されます。適用できる原子数に制限がありますが処理が高速です。

方法が「OpenBabel」の場合は CygwinWM に搭載された OpenBabel が使用されます。処理が低速ですが、適用できる原子数に制限がなく、力場の種類などのパラメータを細かく調整できます。

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。

すべての結合を削除

全ての結合を削除します。

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。

不明な元素を水素に変更

Lp やダミー原子として認識された原子を水素に変更します。

ヒント: CIF ファイル中の重水素を水素に変更する際などに有用です。

分子毎に異なる残基番号を割り当て

分子毎に異なる残基番号を割り当てます。結合で繋がる原子群が分子として認識されます。

分子毎に異なる残基番号を割り当て

分子毎に異なる残基番号を割り当てます。結合で繋がる原子群が分子として認識されます。

全ての最適化フラグを解除

全ての原子の最適化フラグをデフォルト値（可変）にします。

結合をファイルから読み込む

現在の構造の結合情報を、指定したファイルに書かれた構造の結合情報で上書きします。

MD 計算（LAMMPS, Gromacs など）において力場を割り当てた後に力場割り当て前の結合次数から変化する場合、力場割り当て前の状態で mol2, wmm などの形式でファイルを保存しておき、力場割り当て後に本機能でそのファイルを読み込むと、力場割り当て前の結合情報に戻すことができます。一度力場を割り当てて MD 計算を実施した後にもう一度力場を割り当てたいが、最初の力場割り当て時と結合次数が変化してしまい力場が割り当てられないようなケースで有用な機能です。

力場割り当て後の結合次数は、割り当てられた力場の結合平衡長から Winmostar の判定基準で決められるため、力場の種類によっては先述の現象が発生します。

選択原子の電荷を同一残基内で分配

選択原子の電荷を、その原子が属する残基内の他の原子に分配します。この機能を利用すると、選択原子を削除する前後で、同一残基内の電荷の合計が変化しなくなります。

座標が重複する原子を統合

系内の全原子に対して、座標と元素が重複する原子を探して、重複する原子については 1 つに集約します。座標が重複しているか否かの判断には、閾値を設定することができます。

6.2.19 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。

原子番号でソート

原子番号の順に並ぶように原子の番号を並べ替えます。

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。

分子でソート

同じ分子に含まれる原子が連続するよう原子の順番を並べ替えます。

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。

座標でソート

選択した軸（x, y, z, a, b, c）上の座標の値で原子の順番を並べ替えます。

分子内で末端から順にソート

分子内で末端から順にナンバリングします。ポリマーの両末端を選択する際などに有用です。

6.2.20 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。

慣性主軸に設定

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。

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。

座標軸を交換

座標軸同士を交換し、座標系を取り直します。

選択原子を a/b/c 軸の下限に設定

シミュレーションセルが定義された系において、マーカーの付いた原子が a, b または c 軸の下限に来るように座標系を並進移動させます。

6.2.21 座標を反転/キラリティ

X/Y/Z/a/b/c 軸方向に座標を反転

指定した軸を反転させ、座標系を取り直します。

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。

6.2.22 セルを作成/編集

セルを作成

シミュレーションセルを作成します。

- *Set Margin* にチェックを入れた場合は、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・最大値から指定した距離だけ離れた場所にセルの境界を作成します。*Use Cubic Cell* にチェックを入れた場合は、立方体のセルが作成されます。
- *Set Dimension* にチェックを入れた場合は、指定した大きさの立方体のセルが作成されます。

セルを変形

1. *How to transform cell* においてセルの変形方法を指定します。
   - 選択した軸方向にのみセルを変形する場合は *Transform only along the selected axis* にチェックを入れます。変形量（長さ）で指定する場合は *Set incremental length* 、変形後のサイズで指定する場合は *Set total length* 、ひずみで指定する場合は *Set normal strain* 、変形後の密度で指定する場合は *Set density* をそれぞれ選びます。x/y/z 軸を選択した場合はひずみのみで指定します。直方体セルでない場合は、x/y/z 軸と a/b/c 軸の変形は異なります。
   - 相似的にセルを変形する場合は *Transform similarly* にチェックを入れます。変形後の密度で指定する場合は *Set target density* 、変形後の体積で指定する場合は *Set target volume* をそれぞれ選びます。

- せん断ひずみを与える場合は *Transform by shear strain* にチェックを入れます。変形する方向と与えるひずみを指定します。
- セルの角度を変更する場合は *Transform by angle* にチェックを入れます。変形する角度の種類と値を指定します。

2. *Atomic positions* において原子の動かし方を指定します。

- 原子位置は固定でセルのみ変更する場合は *Do not change* にチェックを入れます。
- セルの変形に伴い原子位置も変更する場合は *Move with keeping fractional coordinate* にチェックを入れます。分子系では、 *Keep intramolecular coordinates* にチェックを入れ、分子内座標は固定します。

手動でセルを編集

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。*Lattice 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。*Lattice Constants* にはセルの各断面の面積が表示されます。

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 **セルを変形** 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。

6.2.23 セルを削除

セルを削除します。

6.2.24 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。

6.2.25 電荷を編集

電荷の値を編集します。電荷の種類を指定して、ユーザ電荷へ設定します。指定した電荷を削除することもできます。全電荷が特定値になるように調整することができます。

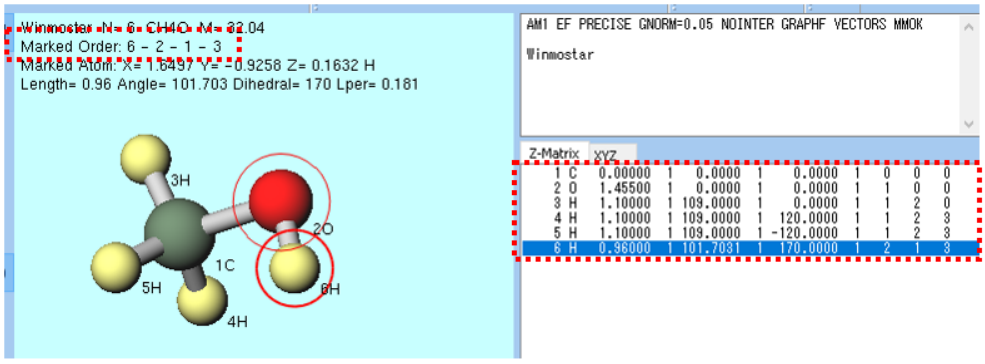
6.3 選択メニュー

原子・分子を選択する機能に関するメニューです。

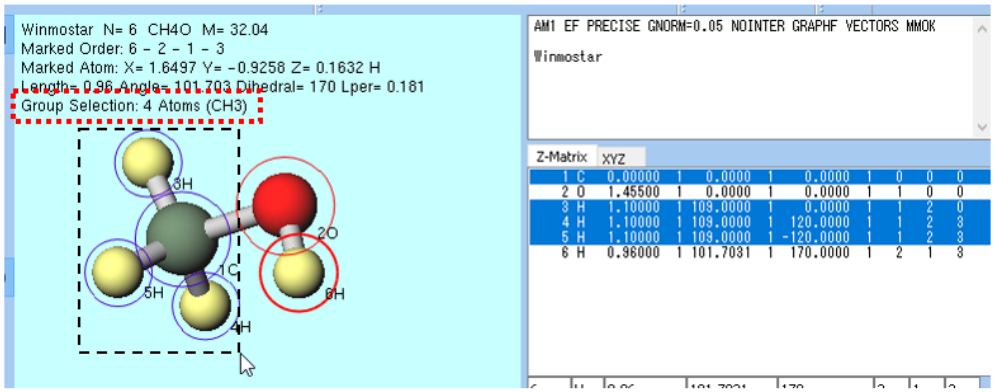
ヒント：原子の選択方法

原子を選択する方法には、**赤丸のマーカーを用いる方法** と、**青丸のグループ選択を用いる方法** があります。

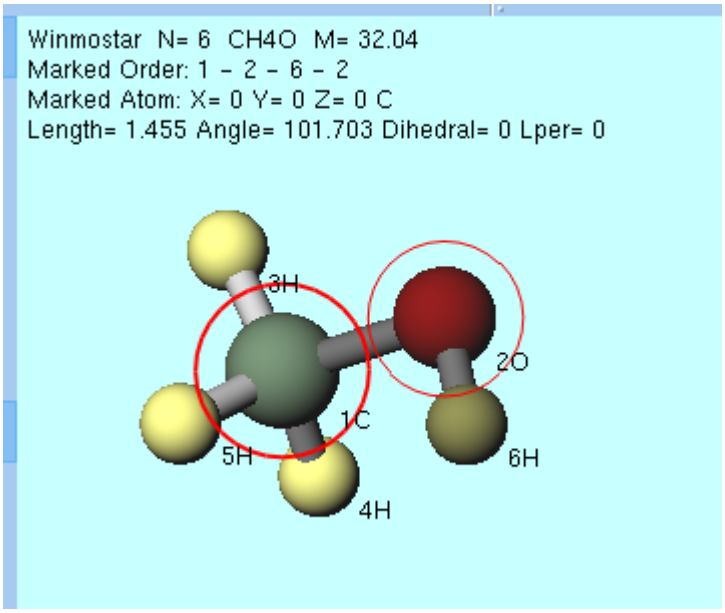
赤丸のマーカーを用いる方法 は主に 1 原子に対する操作で使われます。分子表示エリアで 左クリック した原子にマーカーが移動します。下図のメタノール分子の例では、OH（ヒドロキシ）基の酸素（赤）→ 水素（黄色）の順に 左クリック しており、最後にマーカーが付けられた原子に太赤丸、1 つ前にマーカーを付けられた原子に細赤丸が付いています。また、下図右赤枠内の、**座標表示エリア** で 左クリック することでもマーカーが移動します。マーカーが付けられた原子は過去 4 つ分記憶され、下図左上赤枠内のように表示されます（下図の場合は *Marked Order: 6 - 2 - 1 - 3* ）。各原子の番号は **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も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 することでも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、 **マーカー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ーが付けられた 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 してマーカーを移動させた後、 **編集** → **グループ編集** → **グループを軸回転（選択 *2* 原子, マウス操作）** を選択すると、酸素-炭素の間で分断される構造のうち、最後にマーカーが付けられた 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 *Apply* 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 *Apply* 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 *Apply* ボタン下のリストで確認できます。
`charge 0.5`	電荷が 0.5 の原子を選択します。 ±0.1 %の許容誤差が設けられています。
`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。
`x< 10`	x 座標が 10 Angstrom 未満の座標を選択します。(x と<の間にスペースなし) 同様に y,z についても使用可能です。 `x>` , `x=>` , `x<=` も使用可能です。
`bondto H`	H 原子に結合する原子を選択します。
`group mygroup`	mygroup という登録グループを選択します。

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。

また、整数を入力するところに `%2==0` と入力すると 2 で割った余りが 0 になる数列が代入されます。例えば `site %3==1` と入力するとサイトが 1, 4, 7, 10... の原子が選択されます。

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。

6.3.9 現在のグループに結合する原子をグループ選択

現在の選択グループに結合する原子を追加でグループ選択します。

6.3.10 現在のグループに隣接する原子をグループ選択

現在の選択グループに隣接する原子をグループ選択します。ここでは、全原子にボロノイ分割を適用した際に、同一のボロノイ境界を有する原子を、隣接する原子を定義しています。

6.3.11 現在のグループに隣接する分子をグループ選択

現在の選択グループに隣接する分子をグループ選択します。ここでは、全原子にボロノイ分割を適用した際に、同一のボロノイ境界を有する原子を、隣接する原子を定義しています。

6.3.12 マークした原子の周辺の原子をグループ選択

マークした原子から指定距離内に存在する原子をグループ選択します。

6.3.13 マークした原子の周辺の分子をグループ選択

マークした原子から指定距離内に重心が存在する分子をグループ選択します。

6.3.14 マークした原子を含む残基をグループ選択

マークした原子を含む残基をグループ選択します。残基番号が同じで原子の ID が連続しているものが同じ残基であると判定されます。

6.3.15 分子種ごとに拡大表示してグループ選択

分子種ごとに分子を 3D で拡大表示して、原子をグループ選択できるようにします。Create Group ウィンドウで、Target で分子種を切り替え、ウィンドウ左側で Ctrl+クリックで原子（サイト）を選択します。Add ボタンをクリックすると選択されたサイトが登録され、OK をクリックすると、各分子の登録されたサイトについてのグループが作成されます。Apply to First Molecule Only にチェックを入れた場合は、選択した分子種の 1 番目の分子に対してのみ処理を実行します。

6.3.16 グループを登録

グループ選択されたグループに名前を付けて登録し、 **登録グループを選択** から呼び出せるようにします。

6.3.17 登録グループを選択

グループを登録 で登録されたグループを呼び出します。LAMMPS 実行時には、ここにリストアップされたグループが ndx ファイル内に出力されます。Winmostar を再起動した後も登録グループを引き継ぎたい場合は、 **登録グループを *ndx* ファイルに書き出し** を用いて ndx ファイルに書き出した後、 ***ndx* ファイルからグループを読み込み** を用いて読み込みます。

登録されたグループの名前を変更

グループを登録 で登録されたグループの名前を変更します。

登録されたグループを削除

グループを登録 で登録されたグループを削除します。

6.3.18 ndx ファイルからグループを読み込み

ndx ファイルに出力されたグループを読み込み、**登録グループを選択** から呼び出せるようにします。

6.3.19 登録グループを ndx ファイルに書き出し

登録グループを選択 に登録されたグループを ndx ファイルに出力します。

6.3.20 グループを ndx ファイルに追加

グループ選択されたグループを、指定した ndx ファイルに追加します。

6.3.21 グループを結合して転置

含まれる原子の数が等しい複数のグループを結合し、順序を転置します。例えば、グループ A に 1 2 3、グループ B に 4 5 6 が登録されていて本機能をグループ A とグループ B に適用した場合、1 4、2 5、3 6 という 3 つのグループが作成されます。

6.4 表示メニュー

6.4.1 プロジェクト表示エリアを表示

メインウィンドウでプロジェクト表示エリアの表示・非表示を切り替えます。

6.4.2 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。

6.4.3 三面図を表示

分子表示エリアを三面図表示にします。

6.4.4 座標表示形式を切り替え

座標表示エリア での表示形式を指定します。ソルバの入力ファイルにおける座標の出力形式を切り替える際は、各種ソルバのキーワード設定ウィンドウで出力形式を選択してください。

ヒント: **座標表示エリア** 上部のチェックボックスでも切り替えることができます。

6.4.5 表示をリセット

カメラをデフォルト位置に戻します。

6.4.6 表示方向を変更

カメラの視線の方向を変更します。

6.4.7 拡大/縮小

視野を拡大または縮小します。

6.4.8 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化しません。

6.4.9 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。

6.4.10 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。

6.4.11 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。

視線周りで回転

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。

視線周りで回転 (数値を指定)

表示の回転角度を入力します。

6.4.12 表示プリセット

表示の設定を一括で保存・読み込みします。

6.4.13 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。

6.4.14 奥行き表現を使用

ここにチェックが入っている場合は、分子表示エリアにフォグが適用されます。手前と奥の原子の区別がつきやすくなります。フォグの強さは **ツール** → **環境設定** **メニュー** にて設定できます。

6.4.15 光沢表現を使用

ここにチェックが入っている場合は、分子表示エリアで原子に光沢が掛かります。

6.4.16 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。

6.4.17 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。
番号	原子の通し番号を表示します。
元素	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。
NBO 電荷	各種ログファイルを開いた際に読み込まれる NBO(Natural Bond Orbital) 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。
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。
差電子密度	差電子密度を表示します。

6.4.18 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。

6.4.19 分子の表現形式

分子の表現方法（モデル）を選択します。

6.4.20 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。

6.4.21 透明化

選択グループあるいは全原子の透明・不透明の設定および透明度を調整します。

6.4.22 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。メインウィンドウのモデルが電荷情報を持っている場合は Property として読み込まれます。

6.4.23 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。

Mercury

Mercury を起動します。読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。

6.4.24 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 *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 MOPAC 本体を入手し、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 ワークフロー設定

プロジェクトモードにおける MOPAC の計算フローを設定、実行します。プロジェクトモードのローカルジョブでは **ツール** → **環境設定** → **プログラムパス** の *MOPAC(1)* に指定したバイナリが利用されます。

Preset
設定のプリセットを呼び出し、保存します。

# of Jobs
ジョブの数を指定します。

Enable parameter/structure scan
この機能を使うためにはアドオンの購入が必要です。特定のパラメータだけが異なる複数の計算を流したり（パラメータスキャン）、複数の構造に対し同一のパラメータで計算を流す（構造スキャン）ことが可能となります。

Config をクリックするとスキャン計算の設定画面が出現します。

パラメータスキャンの際は *Target Variable* に%WM_SCAN1%を選択し、 *Values* の各行に%WM_SCAN1%に設定したいパラメータを入力します。そして、ワークフロー設定ウィンドウまたはキーワード設定ウィンドウにおいて設定したいパラメータに%WM_SCAN1%と入力します。Values の各行にスペース区切りで値が記入されている場合は、1 列目の値を%WM_SCAN1_1%、2 列目の値を%WM_SCAN1_2%... といった具合に参照することができます。

並列数をスキャンしたい場合は、# of Threads または# of Procs を選択します。

構造スキャンの際は、分子表示エリアでアニメーションが出現した状態（SDF ファイルを開くなど）で、 *Target Variable* に%WM_STRUCT%を選択します。また、構造スキャン実行時には作業フォルダに label_scan_struct.txt というファイル名で、アニメーション表示エリアのリストの文字列が保存されます。

スキャン計算の終了後は **ファイル** → **プロジェクト** → **スキャン結果表示** を利用して計算結果を集計します。

Import
Export で出力した設定を読み込みます。ボタン右の矢印をクリックすると、過去同じプロジェクトまたは Winmostar 上で使用した設定を呼び出すことができます。

Export
設定をファイルに出力します。

OK
設定した内容で計算を実行またはファイルを生成します。詳しくは **プロジェクトモードの場合** を参照してください。

Details
計算条件を詳細に設定します。 **キーワード設定** が立ち上がります。

Task
計算の種類を指定します。

	設定内容
Energy	Method=1SCF
Optimize	Method=EF
IR	Method=FORCE
Optimize(TS)	Method=TS
IRC(Forward)	Method=IRC=1 LARGE=50
IRC(Reverse)	Method=IRC=-1 LARGE=50
Scan	Method=EF 指定した Scan 内容を入力の最終行に追加

Method
計算手法 (Hamiltonian) を指定します。

UHF
閉殻系か開殻系での計算を指定します。

Charge
電荷を指定します。

Multiplicity
スピン多重度を指定します。

6.5.2 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。

Easy Setup
簡易設定画面を表示します。

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, MOPAC2016
PM3	MOPAC 6, MOPAC 7, MOPAC 93, MOPAC 97, MOPAC 2000, MOPAC 2002, MOPAC 2006, MOPAC 2009, MOPAC 2012, MOPAC2016
RM1	MOPAC 2007, MOPAC2016
AM1 EXTERNAL=RM1.rm1	MOPAC 7.1, MOPAC 93, MOPAC 97, MOPAC 2000, MOPAC 2002, MOPAC 2006, MOPAC 2009, MOPAC 2012
PM6	MOPAC 2007, MOPAC 2009, MOPAC 2012, MOPAC2016
PM7	MOPAC 2012, MOPAC2016
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, MOPAC2016
MNDO-d	MOPAC 97, MOPAC 2000, MOPAC 2002, MOPAC 2006, MOPAC 2009, MOPAC 2012, MOPAC2016

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。

Coordinate format
原子座標の形式（XYZ もしくは Z-matrix）を指定します。

Reset
設定をリセットします。

Import
設定ファイルを読み込みます。

Export
設定ファイルを出力します。

6.5.3 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。

6.5.4 (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、**座標表示形式を切り替え** の選択肢（ *Z-Matrix* または *XYZ* ）および **座標表示エリア** の *Z-Matrix / XYZ* タブの選択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** には、それぞれバージョンの異なる MOPAC 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。*(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。各メニューで使うプログラムパスは、 **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別途入手し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。
作業フォルダ `water_mop_tmp\`	作業フォルダです。

6.5.5 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。

6.5.6 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。

6.5.7 アニメーション

構造最適化 (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 **アニメーション操作エリア** を参照してください。

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 **アニメーション操作エリア** を参照してください。

6.5.8 結果解析

分子軌道, 電荷 (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** , *Surface Setup • Cubegen* **ウィンドウ** を参照してください。

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。

IR スペクトル (out)

out ファイルを選択し、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。

6.5.9 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** からも設定することができます。

6.6 *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 ワークフロー設定

プロジェクトモードにおける CNDO/S の計算フローを設定、実行します。

Preset
設定のプリセットを呼び出し、保存します。

# of Jobs
ジョブの数を指定します。

Enable parameter/structure scan
この機能を使うためにはアドオンの購入が必要です。特定のパラメータだけが異なる複数の計算を流したり（パラメータスキャン）、複数の構造に対し同一のパラメータで計算を流す（構造スキャン）ことが可能となります。

Config をクリックするとスキャン計算の設定画面が出現します。

パラメータスキャンの際は *Target Variable* に%WM_SCAN1%を選択し、 *Values* の各行に%WM_SCAN1%に設定したいパラメータを入力します。そして、ワークフロー設定ウィンドウまたはキーワード設定ウィンドウにおいて設定したいパラメータに%WM_SCAN1%と入力します。Values の各行にスペース区切りで値が記入されている場合は、1 列目の値を%WM_SCAN1_1%、2 列目の値を%WM_SCAN1_2%... といった具合に参照することができます。

並列数をスキャンしたい場合は、# of Threads または# of Procs を選択します。

構造スキャンの際は、分子表示エリアでアニメーションが出現した状態（SDF ファイルを開くなど）で、 *Target Variable* に%WM_STRUCT%を選択します。また、構造スキャン実行時には作業フォルダに label_scan_struct.txt というファイル名で、アニメーション表示エリアのリストの文字列が保存されます。

スキャン計算の終了後は **ファイル** → **プロジェクト** → **スキャン結果表示** を利用して計算結果を集計します。

Import
Export で出力した設定を読み込みます。ボタン右の矢印をクリックすると、過去同じプロジェクトまたは Winmostar 上で使用した設定を呼び出すことができます。

Export
設定をファイルに出力します。

OK
設定した内容で計算を実行またはファイルを生成します。詳しくは **プロジェクトモードの場合** を参照してください。

Details
計算条件を詳細に設定します。 **キーワード設定** が立ち上がります。

Task
計算内容を指定します。（UV-Vis のみ）

Method
計算方法を指定します。

Charge
電荷を指定します。

Multiplicity
スピン多重度を指定します。

6.6.2 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 用のファィルを出力します。

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。

- Za * Zb / l
- Za * Zb * γ 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。

6.6.3 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。

6.6.4 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。
作業フォルダ `water_cnd_tmp\`	作業フォルダです。

6.6.5 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。

6.6.6 結果解析

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** , *Surface Setup • Cubegen* **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 ワークフロー設定

プロジェクトモードにおける GAMESS の計算フローを設定、実行します。プロジェクトモードのローカルジョブでは **ツール** → **環境設定** → **プログラムパス** の *GAMESS(1)* に指定したバイナリが利用されます。

Preset
設定のプリセットを呼び出し、保存します。

# of Jobs
ジョブの数を指定します。

Enable parameter/structure scan
この機能を使うためにはアドオンの購入が必要です。特定のパラメータだけが異なる複数の計算を流したり（パラメータスキャン）、複数の構造に対し同一のパラメータで計算を流す（構造スキャン）ことが可能となります。

Config をクリックするとスキャン計算の設定画面が出現します。

パラメータスキャンの際は *Target Variable* に%WM_SCAN1%を選択し、 *Values* の各行に%WM_SCAN1%に設定したいパラメータを入力します。そして、ワークフロー設定ウィンドウまたはキーワード設定ウィンドウにおいて設定したいパラメータに%WM_SCAN1%と入力します。Values の各行にスペース区切りで値が記入されている場合は、1 列目の値を%WM_SCAN1_1%、2 列目の値を%WM_SCAN1_2%... といった具合に参照することができます。

並列数をスキャンしたい場合は、# of Threads または# of Procs を選択します。

構造スキャンの際は、分子表示エリアでアニメーションが出現した状態（SDF ファイルを開くなど）で、 *Target Variable* に%WM_STRUCT%を選択します。また、構造スキャン実行時には作業フォルダに label_scan_struct.txt というファイル名で、アニメーション表示エリアのリストの文字列が保存されます。

スキャン計算の終了後は **ファイル** → **プロジェクト** → **スキャン結果表示** を利用して計算結果を集計します。

Import
Export で出力した設定を読み込みます。ボタン右の矢印をクリックすると、過去同じプロジェクトまたは Winmostar 上で使用した設定を呼び出すことができます。

Export
設定をファイルに出力します。

OK
設定した内容で計算を実行またはファイルを生成します。詳しくは **プロジェクトモードの場合** を参照してください。

Details
計算条件を詳細に設定します。 **キーワード設定** が立ち上がります。

Task
計算の種類を指定します。冒頭に$から始まるグループ名が無いキーワードは$CONTRL のものです。

	設定内容
Energy	RUNTYP=ENERGY
Optimize	RUNTYP=OPTIMIZE
IR	RUNTYP=HESSIAN
Raman	RUNTYP=RAMAN
TDDFT	RUNTYP=ENERGY TDDFT=EXCITE $TDDFT NSTATE=10
Optimize(TS)	RUNTYP=SADPOINT $STATPT HESS=CALC
Optimize(TDDFT)	RUNTYP=OPTIMIZE TDDFT=EXCITE $TDDFT NSTATE=10
IRC(Forward)	RUNTYP=IRC $STATPT HESS=READ $IRC FORWRD=.TRUE. NPOINT=20 MXOPT=40 SADDLE=.TRUE.
IRC(Reverse)	RUNTYP=IRC $STATPT HESS=READ $IRC FORWRD=.FALSE. NPOINT=20 MXOPT=40 SADDLE=.TRUE.
Optimize+IR	RUNTYP=OPTIMIZE $STATPT HSSEND=.TRUE.
Optimize(TS)+IR	RUNTYP=SADPOINT $STATPT HESS=READ HSSEND=.TRUE.

Method
計算手法 (Hamiltonian) を指定します。冒頭に$から始まるグループ名が無いキーワードは$CONTRL のものです。

	設定内容
HF	HF
各種 DFT	DFTTYP=各種 DFT (DFT-D3 の場合) $DFT IDCVER=3
各種半経験的分子軌道法	$BASIS GBASIS=AM1 もしくは PM3
MP2	MPLEVL=2 $SYSTEM MEMDDI=500
CCSD	CCTYP=CCSD $SYSTEM MEMDDI=500

Basis set
基底関数を指定します。

Charge
電荷を指定します。

Multiplicity
スピン多重度を指定します。

Solvent
溶媒種及び溶媒計算方法を指定します。冒頭に$から始まるグループ名が無いキーワードは$PCM のものです。

溶媒計算方法	設定内容
PCM	SOLVNT=溶媒種
SMD	SOLVNT=溶媒種 SMD=.TRUE. IEF=-3 $TESCAV MTHALL=2

6.7.2 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
スピン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
分子構造座標の形式を指定します。$DATA の座標形式と連動しています。

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。%NZVAR%には、$CONTRL の COORD=ZMTMPC かつ $ZMAT に IFREEZ を含む場合は 3N-6、$ZMAT に IFREEZ を含む、Cartesian 座標部分固定を設定している、$ZMAT に NONVDW を含まず分子数が 2 以上もしくは原子数 4 以下で$CONTRL の RUNTYP が OPTIMIZE、$ZMAT の Set "DLC=.T. AUTO=.T." のチェックが入っていない、いずれかの場合は 0、それ以外は 5000 が代入されます。

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）

PP
Pseudopotential（有効内殻ポテンシャル（ECP））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。

CITYP
配置間相互作用（CI）計算を行うかどうかを指定します。

CCTYP
結合クラスター（CC）計算を行うかどうかを指定します。

ISPHER
基底関数を Cartesian 関数もしくは球面調和関数で扱うかを指定します。（デフォルト -1 = Cartesian）

MPLEVL
Moller-Plesset 摂動（MP）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
基底関数系を指定します。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を指定します。

NGAUSS
Gaussian 関数の数を指定します。

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-分極関数の数を指定します。

NFFUNC
加える f-分極関数の数を指定します。

NPFUNC
加える p-分極関数の数を指定します。

DIFFSP
sp-diffuse 関数を加えるかどうかを指定します。

DIFFS
s-diffuse 関数を加える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。

Advanced(1) タブ

$SYSTEM

TIMLIM
計算の制限時間を指定します。（デフォルト 525600 分）

MWORDS
各プロセスのメモリ最大使用量を指定します。（デフォルト 1MW）

MEMDDI
DDI 用総和メモリ最大使用量を指定します。（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。

DIIS
Pulay DIIS 法を使用するかどうかを指定します。

SOSCF
Second-Order SCF 法を使用するかどうかを指定します。

FDIFF
Fock 行列計算において、差分のみ計算するかどうかを指定します。

SHIFT
レベルシフト法を使用するかどうかを指定します。

FSHIFT
レベルシフト法のシフト値を記入します。（デフォルト 0.0 Hartree）

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。

$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。

HSSEND
計算の最後に Hessian 行列を求めるかどうかを指定します。

IFREEZ(1)
固定する座標を指定します。

Others
その他のキーワードを記入します。

Advanced(2) タブ

$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。

$FORCE

TEMP
熱力学データ計算における温度（Kelvin）を指定します。（デフォルト 298.15）

Others
その他のキーワードを記入します。

Z-Matrix タブ

$ZMAT

Set "DLC=.T. AUTO=.T." if RUNTYP=OPTIMIZE, (# of atoms)>5, & ((# of mols)=1 or NONVDW exists)
チェックが入っていた場合は%ZMATDLC%を設定します。%ZMATDLC%には、原子数5以上かつ、分子数1もしくはNONVDWを含みRUNTYP=OPTIMIZEの場合、"DLC=.T. AUTO=.T."を設定します。

Others
その他のキーワードを記入します。

DFT タブ

$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）

DC
Grimme の経験的分散力補正を行うかどうかを指定します。

IDCVER
Grimme の経験的分散力補正のバージョンを指定します。

NRAD
Euler-Maclaurin 求積法の動径方向の点数を指定します。（デフォルト 96）

NLEB
Lebedev 求積法の角度方向の点数を指定します。（デフォルト 302）

NRAD0
粗いグリッド点での NRAD。（デフォルト 24 か NRAD/4 の小さい方）

NLEB0
粗いグリッド点での NLEB。（デフォルト 110）

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（基底状態を除く）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。

MP2 タブ

$MP2

CODE
使用する MP2 コードを指定します。

Others
その他のキーワードを記入します。

Solvent タブ

$PCM

SOLVNT
溶媒を指定します。

SMD
SMD（Solvent Model Density）を使用するかどうか指定します。

IEF
PCM モデルの種類を指定します。

ICAV
Cavitation エネルギーを計算するかどうか指定します。

TABS
温度（Kelvin）を指定します。（デフォルト 298.0）

Others
その他のキーワードを記入します。

$PCMCAV

RADII
空洞の半径の種類を指定します。

Others
その他のキーワードを記入します。

$TESCAV

MTHALL
TESSELATION の種類を指定します。（デフォルト 4）

NTSALL
Tessera 数を指定します。（デフォルト 60）

Others
その他のキーワードを記入します。

IRC タブ

$IRC

FORWRD
正方向か逆方向かを指定します。

PACE
IRC 計算方法を指定します。

NPOINT
IRC 点数を指定します。

MXOPT
各 IRC 点における構造最適化の最大ステップ数を指定します。

STRIDE
IRC 点間の距離を指定します。

SADDLE
$DATA の構造が鞍点かどうかを指定します。

OPTTOL
極小点に到達したかを判断するためのエネルギー微分値の閾値を指定します。

Comment タブ
コメントを記入します。

Preview タブ
設定キーワードのプレビューが表示されます。

Import $HESS
$HESS を punch ファイルから読み込みます。

Import $VEC
$VEC を punch ファイルから読み込みます。

Reset
設定をリセットします。

Import
設定ファイルを読み込みます。

Export
設定ファイルを出力します。

6.7.3 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。

6.7.4 (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、$CONTRL の COORD の設定内容に応じて、$DATA の原子座標形式が変化します。ZMTMPC の場合は MOPAC の Z-matrix 形式、それ以外の場合は Cartesian 形式となります。

(1) GAMESS **実行** , *(2) GAMESS* **実行** には、それぞれバージョンの異なる GAMESS 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。*(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。各メニューで使うプログラムパスは、**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。

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。

ジョブは *Winmostar Job Manager* を通じて実行されます。

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 ログの抜粋を表示

out ファイルの主要な情報を抜粋して表示します。

6.7.7 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 **アニメーション操作エリア** を参照してください。

6.7.8 結果解析

分子軌道, 電荷

out ファイルの情報から分子軌道, 電荷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** , *Surface Setup • Cubegen* **ウィンドウ** を参照してください。

UV-Vis スペクトル

out ファイルの情報から UV-Vis スペクトルを表示します。

サブウィンドウの操作方法は *UV-Vis Spectrum* **ウィンドウ** を参照してください。

NMR スペクトル

out ファイルの情報から NMR スペクトルを表示します。

サブウィンドウの操作方法は *NMR* **ウィンドウ** を参照してください。

IR/ラマンスペクトル

out ファイルの情報から振動スペクトル（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。

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。

「分子構造的に等価な原子に同じ電荷を割り当てますか？」と聞かれ、 **はい** をクリックすると内部的には acpype を、 **いいえ** をクリックすると内部的には AmberTools を直接使って RESP 電荷を算出しています。基本的には **はい** をクリックする方を推奨しますが、大きい分子の場合などに処理が正常終了しない場合があり、そのような場合は **いいえ** をクリックしてください。両者の計算結果は、大きくは変化しないことが期待されます。**いいえ** を選択した後に分子構造的に等価な原子（例えばメチル基の 3 つの水素原子）の電荷を平均化したい場合は、 **グループの電荷を平均化** を使用してください。

なお、本機能で Firefly はサポートされていません。

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

6.7.9 PDB ファイルを編集

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。

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 ワークフロー設定

プロジェクトモードにおける Gaussian の計算フローを設定、実行します。プロジェクトモードのローカルジョブでは **ツール** → **環境設定** → **プログラムパス** の *Gaussian* に指定したバイナリが利用されます。

Preset
: 設定のプリセットを呼び出し、保存します。

# of Jobs
: ジョブの数を指定します。

Enable parameter/structure scan
: この機能を使うためにはアドオンの購入が必要です。特定のパラメータだけが異なる複数の計算を流したり（パラメータスキャン）、複数の構造に対し同一のパラメータで計算を流す（構造スキャン）ことが可能となります。

  Config をクリックするとスキャン計算の設定画面が出現します。

  パラメータスキャンの際は *Target Variable* に%WM_SCAN1%を選択し、 *Values* の各行に%WM_SCAN1%に設定したいパラメータを入力します。そして、ワークフロー設定ウィンドウまたはキーワード設定ウィンドウにおいて設定したいパラメータに%WM_SCAN1%と入力します。

Values の各行にスペース区切りで値が記入されている場合は、1 列目の値を%WM_SCAN1_1%、2 列目の値を%WM_SCAN1_2%... といった具合に参照することができます。

並列数をスキャンしたい場合は、# of Threads または# of Procs を選択します。

構造スキャンの際は、分子表示エリアでアニメーションが出現した状態（SDF ファイルを開くなど）で、 *Target Variable* に%WM_STRUCT%を選択します。また、構造スキャン実行時には作業フォルダに label_scan_struct.txt というファイル名で、アニメーション表示エリアのリストの文字列が保存されます。

スキャン計算の終了後は **ファイル** → **プロジェクト** → **スキャン結果表示** を利用して計算結果を集計します。

Import
Export で出力した設定を読み込みます。ボタン右の矢印をクリックすると、過去同じプロジェクトまたは Winmostar 上で使用した設定を呼び出すことができます。

Export
設定をファイルに出力します。

OK
設定した内容で計算を実行またはファイルを生成します。詳しくは **プロジェクトモードの場合** を参照してください。

Details
計算条件を詳細に設定します。 **キーワード設定** が立ち上がります。

Task
計算の種類を指定します。なお、CHelpG 電荷はログファイル読み込み時に ESP 電荷として読み込まれます。

	設定内容
Energy	
Optimize	opt
IR	freq=noraman
IR+Raman	freq=raman
TDDFT	td=(nstates=10)
NMR	nmr
Optimize(TS)	opt=(ts,noeigentest,calcfc)
Optimize(TDDFT)	opt td
IRC(Forward)	irc=(forward,maxpoint=20,stepsize=5,calcfc) Pop 指定なし
IRC(Reverse)	irc=(reverse,maxpoint=20,stepsize=5,calcfc) Pop 指定なし
Optimize+IR	opt freq=noraman
Optimize+IR+Raman	opt freq=raman
Optimize(TS)+IR	opt=(ts,noeigentest,calcfc) freq=noraman

Method
計算手法 (Hamiltonian) を指定します。

	設定内容
HF	HF
各種 DFT	汎関数名 (DFT-D3 の場合) Empirical Dispersion=gd3
各種半経験的分子軌道法	計算方法名
MP2	MP2

Basis set
基底関数を指定します。

Charge
電荷を指定します。

Multiplicity
スピン多重度を指定します。

Solvent
溶媒種及び溶媒計算方法を指定します。

6.8.2 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 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 (使用 CPU コア数) を指定します。

Link0

%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 8 バイトワード単位で指定します。KB, MB, GB, KW, MB, GW, TW の単位を指定することもできます。（デフォルト：800MB）

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。

Charge
電荷の値を指定します。

Multiplicity
スピン多重度を指定します。

Additional Chg./Multi.
追加の電荷とスピン多重度を指定します。

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。

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。

PM6
PM6 ハミルトニアンを用いた半経験的計算を行います。

PM7
PM7 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。

MP2
Hartree-Fock 計算の後に 2 次の Moller-Plesset 相関エネルギー補正を行います。

MP4
Hartree-Fock 計算の後に 4 次の Moller-Plesset 相関エネルギー補正を行います。

CIS
一電子励起 CI 法により励起状態を計算します。

CISD
一電子及び二電子励起 CI 法により基底状態及び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。

Gn 法
G1, G2, G2MP2, G3, G3MP2 G3B3, G3MP2B3, G4, G4MP2 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。

mk
Merz-Singh-Kollman スキームで静電ポテンシャルにフィットした電荷を出力します。

chelp
CHelp スキームで静電ポテンシャルにフィットした電荷を出力します。

chelpg
CHelpG スキームで静電ポテンシャルにフィットした電荷を出力します。

(full,chelp)
CHelp スキームで静電ポテンシャルにフィットした電荷、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。

(fullchelpg)
CHelpG スキームで静電ポテンシャルにフィットした電荷、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。

(full,npa)
Natural Population Analysis による NBO(Natural Bond Orbital) 電荷、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。

OPT/IRC
構造最適化もしくは IRC 計算の制御を行います。

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・修正します。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。

opt=tight
力と座標変化の収束判定の閾値を厳しくします。

opt=(qst2,calcfc)
QST2 計算を実行します。メインウィンドウのアニメーション操作エリアにフレームが 2 つ以上存在している必要があります。qst2 計算の構造には、アニメーションの最初と最後のフレームの構造が使われます。

opt=(qst3,calcfc)
QST3 計算を実行します。メインウィンドウのアニメーション操作エリアにフレームが 3 つ存在している必要があります。qst3 計算の構造には、アニメーションの 3 つのフレームの構造が使われます。

irc=(forward, maxpoint=20, stepsize=5, calcfc)
正方向の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。

irc=(reverse, maxpoint=20, stepsize=5, calcfc)
逆方向の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。

OptMaxCyc
構造最適化ステップの最大数を設定します。

Scrf
溶媒効果を含めた計算を行います。

SCF
SCF 計算の制御をします。

scf=tight
通常の SCF 計算の収束判定です。（デフォルト）

scf=qc
2 次収束法を使用します。

scf=xqc
1 次収束法で収束しない場合、2 次収束法に途中で切り替えます。

scf=(maxcyc=500)
SCF の最大サイクル数を 500 に設定します。

scf=vshift[=N]
軌道エネルギーを N*0.001 Hartree シフトします。N のデフォルト値は 100 です。

Freq
力の定数と振動数の計算を制御します。

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
IR 強度のみ計算し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。

NMR
NMR 計算の制御をします。

nmr
NMR 計算を行います。

nmr=giao
GIAO 法を使用して NMR 計算を行います。（デフォルト）

nmr=csgt
CSGT 法を使用して NMR 計算を行います。

nmr=igaim
ゲージオリジンとして原子中心座標を使用して NMR 計算を行います。

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。（デフォルト 1 重項）

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）

td=50-50
半分は 1 重項、残り半分は 3 重項の状態を計算します。閉殻系のみ有効です。

td=triplets
3 重項状態の計算を行います。閉殻系のみ有効です。

EmpiricalDispersion
経験的分散力を有効化します。

pfd
Petersson-Frisch 分散力を追加します。

gd2
Grimme 分散力の D2 バージョンを追加します。

gd3
Grimme 分散力の D3 バージョンを追加します。

gd3bj
Becke-Johnson 減衰を加えた Grimme 分散力の D3 バージョンを追加します。

Guess
初期軌道の制御をします。

read
checkpoint ファイルから読み込みます。

mix
α - β 及び空間対称性を崩すために HOMO と LUMO を混ぜます。

(mix,always)
mix の操作を構造最適化サイクルごとに行います。

alter
占有と非占有の軌道を入れ替え、電子が入る軌道を入れ替えます。

permute
軌道の順番を並び変えます。電子が入る軌道の指定は行いません。

harris
Harris 汎関数を対角化して初期軌道を作ります。Hartree-Fock と DFT のデフォルトです。

huckel
Huckel 法で得られた軌道を初期軌道とします。

oldhuckel
Gaussian 03 で使われた Huckel 法を使います。

core
Core Hamiltonian を対角化して初期軌道を作ります。

Int
2 電子積分及び DFT グリッドの精度を制御します。

int=(grid=fine)
動径方向 75 点、角度方向 302 点のグリッドを使います。

int=(grid=ultrafine)
動径方向 99 点、角度方向 590 点のグリッドを使います。（デフォルト）

int=(grid=superfine)
動径方向 175 点、角度方向 974 点のグリッドを使います。

int=(acc2e=12)
2 電子積分の精度を 10^{-12} に設定します。

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，入力の配向で計算を実行します。

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。

fchk
Test.FChk ファイルを作成します。

counterpoise
counterpoise 計算を実行します。各原子に設定されるフラグメントの番号には、Winmostar 上の残基番号が割り当てられます。なお、 **分子毎に異なる残基番号を割り当て** 機能を使うと各分子に異なる残基番号を一括で割り当てることができます。

polar
分極率計算を実行します。

cphf=rdfreq
振動数依存 CPHF 計算を実行します。

Config ONIOM
ONIOM 計算の設定をします。事前に *ONIOM* **レイヤーを割り当て** で各原子をレイヤーに割り当てている必要があります。

Hamiltonian
各レイヤーのハミルトニアンを設定します。

Basis
各レイヤーの基底関数を設定します。

Subsection
その他のキーワードを記入します。

Coordinate format
原子座標の形式（Cartesian もしくは Z-matrix）を指定します。

Reset
設定をリセットします。

Import
設定ファイルを読み込みます。

Export
設定ファイルを出力します。

6.8.3 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。

6.8.4 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。

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 `water.log`	計算のログファイルです。
bat ファイル `water.gjf.bat`	Gaussian を実行するためのバッチファイルです。
作業フォルダ `water_gau_tmp\`	作業フォルダです。

ジョブは *Winmostar Job Manager* を通じて実行されます。

6.8.5 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。

6.8.6 アニメーション

構造最適化

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 **アニメーション操作エリア** を参照してください。

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 **アニメーション操作エリア** を参照してください。

6.8.7 結果解析

分子軌道, 電荷

log ファイルの情報から分子軌道, 電荷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** , *Surface Setup • Cubegen* **ウィンドウ** を参照してください。

UV-Vis スペクトル

log ファイルの情報から UV-Vis スペクトルを表示します。

サブウィンドウの操作方法は *UV-Vis Spectrum* **ウィンドウ** を参照してください。

NMR スペクトル

log ファイルの情報から NMR スペクトルを表示します。

サブウィンドウの操作方法は *NMR* **ウィンドウ** を参照してください。

IR/ラマンスペクトル

log ファイルの情報から振動スペクトル（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。

RESP 電荷

RESP 法に基づく点電荷を esp ファイルから算出します。

読み込ませる esp 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、Antechamber を用いて RESP 電荷を算出しています。

本機能を利用する際は、G09.C.01 以降のバージョンを利用する必要があります。G09.C.01 よりも前のバージョンを使う場合は、IOP の変更が必要です。

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

6.8.8 ONIOM レイヤーを割り当て

ONIOM 法計算のレイヤーを設定します。

Show Layer Flags
各原子に割り当てられたレイヤーのフラグを表示します。

Unset Layers for All Atoms
全原子のレイヤーのフラグを削除します。

Select Atoms in High/Middle/Low Layer
High/Middle/Low Layer に設定された原子をグループ選択します。High/Middle/Low Layer に設定されている原子の確認に使います。

Set Selected Group to High/Middle/Low Layer
選択グループの原子を High/Middle/Low Layer に設定します。

Select All
全原子をグループ選択します。

Select None
グループ選択を解除します。

6.8.9 FormChk

G16W,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。

6.8.10 Fchk ファイル読み込み (Cubegen)

G16G,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 *Surface Setup・Cubegen* **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（α - β）

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。

なお、OpenCubegen はおおむね 2GB 程度の fchk ファイルまで対応しています。上限サイズは、分子サイズ、基底関数に依存します。将来的には fchk ファイルサイズの制限を解消する予定です。

6.8.11 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 *Surface Setup・Cubegen* **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。

6.9 *QM → NWChem* メニュー

NWChem に関するメニューです。

6.9.1 NWChem の設定方法

NWChem をインストールするには、2023/04/05 バージョン以降の CygwinWM をインストールしてください。CygwinWM の `/opt_win/NWChem*/bin/` に `nwchem.exe` が収められています。

MPI 並列計算を実行する場合は、Windows 版 NWChem インストールマニュアル に従い MPICH をインストールします。

Winmostar から NWChem を利用するための設定は **ツール** → **環境設定 メニュー** で行います。Winmostar V11.5.0 以降を新規インストールし CygwinWM 2023/04/05 バージョン以降を利用する場合は設定不要です。

まず **プログラムパス** → *NWChem* で使用する NWChwm の `nwchem.exe` を選択します。次に、 **計算** → *mpiexec (NWChem)* で *MPICH* を選択するか、 *Select* を選択し使用する MPI の `mpiexec.exe` を選択します。CygwinWM に収められた NWChem を使う場合は *MPICH* を選択します。最後に、 **計算** → *Options for mpiexec (NWChem)* で **`mpiexec.exe`** の引数を入力します。CygwinWM に収められた NWChem を使う場合は変更不要です。

リモートマシンに 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。

6.9.2 ワークフロー設定

プロジェクトモードにおける Gaussian の計算フローを設定、実行します。プロジェクトモードのローカルジョブでは **ツール** → **環境設定** → **プログラムパス** の *NWChem* に指定したバイナリが利用されます。

Preset
: 設定のプリセットを呼び出し、保存します。

# of Jobs
: ジョブの数を指定します。

Enable parameter/structure scan
: この機能を使うためにはアドオンの購入が必要です。特定のパラメータだけが異なる複数の計算を流したり（パラメータスキャン）、複数の構造に対し同一のパラメータで計算を流す（構造スキャン）ことが可能となります。

  Config をクリックするとスキャン計算の設定画面が出現します。

  パラメータスキャンの際は *Target Variable* に%WM_SCAN1%を選択し、 *Values* の各行に%WM_SCAN1%に設定したいパラメータを入力します。そして、ワークフロー設定ウィンドウまたはキーワード設定ウィンドウにおいて設定したいパラメータに%WM_SCAN1%と入力します。Values の各行にスペース区切りで値が記入されている場合は、1 列目の値を%WM_SCAN1_1%、2 列目の値を%WM_SCAN1_2%... といった具合に参照することができます。

  並列数をスキャンしたい場合は、# of Threads または# of Procs を選択します。

  構造スキャンの際は、分子表示エリアでアニメーションが出現した状態（SDF ファイルを開くなど）で、 *Target Variable* に%WM_STRUCT%を選択します。また、構造スキャン実行時には作業フォルダに label_scan_struct.txt というファイル名で、アニメーション表示エリアのリストの文字列が保存されます。

  スキャン計算の終了後は **ファイル** → **プロジェクト** → **スキャン結果表示** を利用して計算結果を集計します。

Import
: Export で出力した設定を読み込みます。ボタン右の矢印をクリックすると、過去同じプロジェクトまたは Winmostar 上で使用した設定を呼び出すことができます。

Export
設定をファイルに出力します。

OK
設定した内容で計算を実行またはファイルを生成します。詳しくは **プロジェクトモードの場合** を参照してください。

Details
計算条件を詳細に設定します。 **キーワード設定** が立ち上がります。

Task
計算の種類を指定します。

	設定内容
Energy	task energy
Optimize	task optimize
IR	task frequencies
IR+Raman	task raman property response 1 8.8559E-2
TDDFT	task tddft energy notriplet nroots 10 Noautosym True
NMR	task energy task property property shielding
Optimize(TS)	task saddle
Optimize(TDDFT)	task tddft optimize notriplet civecs nroots 10 grad root 1 Noautosym True
Optimize+IR	task optimize task frequencies
Optimize(TS)+IR	task saddle task frequencies
NEB	task neb No Mulliken

Method
計算手法 (Hamiltonian) を指定します。

	設定内容
HF	task scf
各種 DFT	XC 汎関数名 (DFT-D3 の場合) Disp vdw 3

Basis set
基底関数を指定します。

Charge
電荷を指定します。

Multiplicity
スピン多重度を指定します。

Solvent
溶媒種を指定します。

6.9.3 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。

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

Start-up mode
計算を新規に開始する場合は start、すでに実行した計算から継続したい時は restart にします。

Title
タイトルを指定します。

Memory
メモリ使用量を指定します。

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。

XC
DFT の交換相関汎関数を指定します。

cam
長距離補正を指定します。

Disp
経験的分散力補正を指定します。

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。

Advanced タブ

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。

Driver (Optimize)

Maxiter
構想最適化の最大サイクル数を指定します。

Convergence
構造最適化の精度を指定します。

Others
その他の入力要素を記述します。

Geometry

noautoz
内部座標の変換を行わないように設定します。

noautosym
対称性を使わないように設定します。

Symmetry
対称性を設定します。

Others
その他の入力要素を記述します。

SCF/DFT

Maxiter
SCF/DFT エネルギー計算の最大サイクル数を指定します。

Direct
Direct 計算 (2 電子積分を都度計算) を指定します。

Others
その他の入力要素を記述します。

Solvent タブ

COSMO

Solvent
溶媒種を指定します。

Dielec
溶媒の誘電率を指定します。

Ificos
溶媒領域の分割方法を指定します。

do_cosmo_smd
SMD 法の使用を設定します。

do_gasphase
溶媒計算の前に気相の計算を行うかどうかを設定します。

Others
その他の入力要素を記述します。

TDDFT タブ

NOSINGLET
励起一重項の計算を行うかどうかを設定します。

NOTRIPLET
励起三重項の計算を行うかどうかを設定します。

CIVECS
CI ベクトルのファイルへの保存を指定します。

Nroots
計算する励起状態の数を指定します。

Target
ターゲットの励起状態の解の番号を指定します。

TargetSym
ターゲットの励起状態の対称性を指定します。

Grad Root
TDDFT 微分計算のターゲットの励起状態の解の番号を指定します。

Others
その他の入力要素を記述します。

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めます。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。

Others タブ

Other Settings
その他の入力要素を記述します。

Coordinate format
原子座標の形式（Cartesian もしくは Z-matrix）を指定します。

Reset
設定をリセットします。

Import
設定ファイルを読み込みます。

Export
設定ファイルを出力します。

6.9.4 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。

6.9.5 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。

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。
作業フォルダ `water_nw_tmp\`	作業フォルダです。

ジョブは *Winmostar Job Manager* を通じて実行されます。

6.9.6 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。

6.9.7 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 **アニメーション操作エリア** を参照してください。

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 **アニメーション操作エリア** を参照してください。

6.9.8 結果解析

分子軌道, 電荷

out ファイルの情報から分子軌道, 電荷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** , *Surface Setup • Cubegen* **ウィンドウ** を参照してください。

UV-Vis スペクトル

out ファイルの情報から UV-Vis スペクトルを表示します。

サブウィンドウの操作方法は *UV-Vis Spectrum* **ウィンドウ** を参照してください。

NMR スペクトル

out ファイルの情報から NMR スペクトルを表示します。

サブウィンドウの操作方法は *NMR* **ウィンドウ** を参照してください。

IR/ラマンスペクトル

out ファイルの情報から振動スペクトル（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。

6.10 MD メニュー

分子動力学法に関するメニューです。

また、ほぼ全ての機能で *CygwinWM* 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 Packmol を用いた処理が行われます。

作業用フォルダ以下の `packmol.bat`、`packmol.log` に詳細が記載されています。作業用フォルダ以下の `output.pdb` 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す。

Add File
: 系にあらかじめ保存した分子構造ファイルの分子を追加します。ボタンを押した後、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、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。点電荷の情報は mol2、wmm などの形式で保持可能です。

Add SMILES
: SMILES 形式で並べたい分子の種類を指定します。

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。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、セル中心に固定して配置するか指定します。水分子のモデルは、*Options* タブの *Water Model* から選びます。

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 0.5〜0.8 g/cm ^{3} 程度に設定します。

Set Margin from Solute
Method に *Solvate* を選んでいる際に、メインウィンドウ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 Lattice Constants
シミュレーションセルのサイズを直接指定します。 *Same as main window* ボタンを押すと、メインウィンドウに設定されたセルと同じ値が入力されます。

Same as main window
分子表示エリアに表示されているセルの格子定数を設定します。

Change only one direction
2 つの格子定数を固定しながら、指定密度になるよう 1 つの格子定数を動かすときに使用します。 *Box Type* で triclinic を選択すると使えるようになります。特に、界面構造を作成する際に有効な機能です。

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。

Packmol Parameters

Tolerance
Packmol における tolerance パラメータを指定します。原子間の最小距離を指定します。

Tolerance(Fixed)
Position が Fixed の分子に対する、Packmol における tolerance パラメータを指定します。スラブやたんぱく質の中に溶媒を配置したくないときなどに有用です。

Margin
Packmol を使用する場合のセルの端付近の原子を置かない領域の幅を指定します。

Random seed
Packmol を使用する場合の乱数の種を指定します。

Do not rotate
分子の向きを変えずに並べます。ネマティック液晶相などの作成を想定しています。

Automatically change random seed every time
Packmol を使用する場合の乱数の種を毎回自動で変更します。

Use PBC if Margin=0 and Packmol supports it
CygwinWM 2025/7/1 バージョン以降を使用する際に、Margin が 0 の場合は周期境界条件を考慮して分子を配置します。チェックをしていない場合はセル境界を跨ぐ分子が存在しません。2025/7/1 バージョンより前の CygwinWM に搭載された Packmol ではこの機能を利用できません。

SMILES converter
Add SMILES で入力した SMILES を 3 次元構造にするときに使うプログラムを指定します。

Shift origin to cell center
原点をセルの中心に設定します。

Edit Packmol script
Packmol を用いて凝集構造を作る際に、Packmol のコマンドを修正できるようにします。

Reset
このウィンドウにおける設定をリセットします。

Build (Multi)
このウィ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。乱数の種を変えながら複数パターン生成します。使われる乱数の種は、最初の構造では *Random seed* の値、2 番目の構造では *Random seed* の値に 1 足した値、3 番目の構造では *Random seed* の値に 2 足した値（以下同様）が使われます。構造スキャンを用いて初期座標違いの MD 計算を複数実行してサンプリング数を上げる際に有効です。

Build
このウィ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。メインウィンドウのアニメーション操作エリアに複数フレーム存在している場合、それぞれのフレームの構造に対して連続して処理を実行することも可能です。

6.10.2 分子を挿入

mol2 形式で保存された分子を複数個、メインウィ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** 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、 **ファイルをインポート** を選択してください。

基本的な動作は **溶媒を配置/セルを構築** と同じです。

6.10.3 自動で電荷を割り当て

複数分子に対して、自動で電荷を割り当てます。

現在のファイル名の末尾に `_charge_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。詳細な処理については *AM1-BCC/Gasteiger* **電荷を使用** , *RESP* **電荷を使用** , *OPLS-AA* **電荷を使用** を参照してください。

全ての Method を... に設定
チェックを入れた場合には、メインウィンドウに表示されている全ての分子種に対し、プルダウンメニューで指定した Method で電荷を計算します。チェックを入れなかった場合は、各原子種に対し Method を選択してください。

既に電荷が割り当てられた分子種には新たに電荷を割り当てない
チェックを入れた場合には、**全ての** *Method* **を... に設定** にチェックが入っていても、すでに電荷が割り当てられた分子については新たに電荷を割り当てません。

タンパク質・単原子イオン・水には新たに電荷を割り当てない
チェックを入れた場合、タンパク質・単原子イオン・水分子については、この機能で電荷を割り当てません。タンパク質の MD 計算においては、AM1-BCC 等の方法では電荷の計算に時間が掛かり、また力場の割り当て時に残基名から自動的に電荷が割り振られるため、チェックを入れる必要があります

Method
電荷を割り当てる方法を選択します。

Charge
その分子種の電荷を設定します。中性分子では 0、イオンでは+1, -1 などその電荷を指定します。

6.10.4 手動で電荷を割り当て

AM1-BCC/Gasteiger 電荷を使用

メインウィンドウに 1 分子だけ表示されている状態で本機能を呼び出すと、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 Acpype 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 `_acpype_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.acpypeinput_GMX.itp` に記された電荷の値が結果となります。

RESP 電荷を使用

GAMESS を使用して RESP 電荷を算出します。詳細は *RESP* **電荷** を参照してください。本機能で設定される GAMESS のキーワード（基底関数, 計算手法含む）と並列数は **ツール** → **環境設定 メニュー** の **計算** タブの *RESP* **電荷自動計算時のキーワード** *(GAMESS)* および *GAMESS* **による** *RESP* **電荷自動計算時の並列数** で設定することができます。

OPLS-AA 電荷を使用

mktop を使用して OPLS-AA 電荷を算出します。

6.10.5 ポリマー

MD → **ポリマー メニュー** を参照してください。

6.10.6 界面ビルダ

MD → **界面ビルダ メニュー** を参照してください。

6.10.7 分子を置換

指定した分子種の分子を全て他の分子に置換します。あらかじめ、新たに配置される分子（1 分子）を wmm や mol2 形式で保存してから本機能を呼び出してください。

6.10.8 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。

6.10.9 LAMMPS

MD → *LAMMPS* **メニュー** を参照してください。

6.10.10 Gromacs

MD → *Gromacs* **メニュー** を参照してください。

6.10.11 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* → 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. 繰り返し単位をモデリングし、 **繰り返し単位登録** 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。

6.11.1 繰り返し単位登録

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** で使用するための繰り返し単位を登録します。 **設定** で設定したモノマーファイルの保存先に、 `wmo` という拡張子で保存されます。`wmo` 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、本機能を呼び出します。

[Head], [Tail]
選択した Head 原子と Tail 原子の番号が表示されます。

[OK]
繰り返し単位の登録名を入力し、繰り返し単位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。

6.11.2 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、 **繰り返し単位登録** で登録された繰り返し単位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。

[Degree of Polymerization]
重合度を指定します。

[Repeat Unit]
使用する繰り返し単位を選択します。

[Display]
選択した繰り返し単位を表示します。

[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 Configulation]

[Head to Tail]
繰り返し単位の Head 原子と Tail 原子を重ねて結合します。

[Head to Head]
繰り返し単位の Head 原子と Head 原子を重ねて結合します。また、繰り返し単位の 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]
ウィンドウを閉じます。

6.11.3 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、 **繰り返し単位登録** 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。

[First Repeat Unit]
先頭繰り返し単位をリストから選択します。

[Last Repeat Unit]
末尾繰り返し単位をリストから選択します。

[Middle Repeat Unit]
中間の繰り返し単位をリストから選択します。[Number] に繰り返し数を入力します。

[>>Add>>]
選択した繰り返し単位をリストに登録します。

[<<Delete<<]
リストから選択した項目を削除します。

[Display]
選択した繰り返し単位を表示します。

[Delete]
選択された繰り返し単位を削除します。

[Build]
リストの内容に基づいてポリマーを作成します。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。

6.11.4 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、 **繰り返し単位登録** 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。

[Degree of Polymerization]
重合度を指定します。先頭、末尾も含めた数を入力します。

[First Repeat Unit]
先頭繰り返し単位をリストから選択します。先頭繰り返し単位も乱数的に割り当てたいときは空白にします。

[Last Repeat Unit]
末尾繰り返し単位をリストから選択します。末尾繰り返し単位も乱数的に割り当てたいときは空白にします。

[Middle Repeat Unit]
中間の繰り返し単位をリストから選択します。

[>>Add>>]
設定した繰り返し単位名と出現率 (0 < x < 1.0) をリストに登録します。

[<<Delete<<]
リストから選択した項目を削除します。

[Display]
選択した繰り返し単位を表示します。

[Delete]
選択した繰り返し単位を削除します。

[Sum of Ration]
Middle Repeat Unit にリストアップされた Ratio の合計値が表示されます。

[Definition of Ratio]

[Probability of Each Monomer]
出現率 [Add] に従って繰り返し単位を発生させます。最終的な繰り返し単位の比率は出現率に一致するとは限りません。

[Proportion in Total Monomers]
最終的に得られる繰り返し単位の比率は出現率 [Add] に比例します。

[Number of Patterns]
ポリマーのパターンの数を指定します。

[Use Specific Random Seed]
特定の乱数種を使用する場合は、チェックして値を指定します。指定しない場合は違う構造のパターンが得られます。

[Build]
リストの内容に基づいてポリマーを作成します。ポリマー名のフォルダの下にポリマーファイルがパターンの数だけ作成されます。

[Close]
ウィンドウを閉じます。

6.11.5 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ポリマーを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。内部処理は以下の通りです。

1. ポリマーをセル内にランダムに配置します。
2. 各ポリマーの主鎖のみ抜き出して構造最適化します。
3. 各原子が接触しない範囲で追加できる側鎖の原子を追加して構造最適化します。
4. すべての原子が追加されるまで 3 を繰り返します。

[Polymer Available]

[Display]
選択したポリマーを表示します。

[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。

[Simulation Cell] タブ

[Set Density]
密度を指定します。

[Set Dimensions]
直方体セルの各方向の長さを指定します。

[Cubic Cell]
セルの形状を立方体にします。

[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。

[Options] タブ

[MPI]
作成時の最適化に使用する LAMMPS を MPI 並列で計算します。

[Processes]
MPI 並列数を指定します。

[Non-bonded inter-atomic distance tolerance]
非結合原子間距離の最小値の許容値を指定します。指定した許容値で作成できなかった場合は、徐々に許容値を小さくして作成するので、必ず許容値に収まっているとは限りません。許容値の変化はログに出力されます。

[Randomly select random polymers to be used]
ランダムポリマーの場合は、使用するポリマーをランダムに選択します。チェックされていない場合は、順番に使用します。

[Use Specific Random Seed]
特定の乱数種を使用する場合はチェックして値を指定します。指定しない場合は毎回違う構造が得られます。

[Do not twist each polymers]
各ポリマーを直線状に配置します。

[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。

6.11.6 繰り返し単位割り付け

DPD 粒子に対し登録した繰り返し単位を割り付け、全原子 MD の分子構造を取得します。

6.11.7 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。

6.12 *MD* → 界面ビルダ メニュー

あらかじめ用意された複数のシミュレーションセルのファイル、メインウィンドウに表示されている構造、または真空層を接合して界面モデルを作成します。 **ツール → 環境設定 メニュー** で新仕様と旧仕様の機能を切り替えられます。新仕様の機能は次の通りです。

接合後のセルは次の手順で作成されます。

1. Type で指定した構造を読み込みます。その構造が primitive cell であり、Use conventional cell にチェックが入っている場合は、conventional cell に変換します。
2. Wrapping で指定された方法で原子位置を折りたたみます。
3. Operations で指定された操作を Cleave plane, Transform by matrix, Shift の順に適用します。
4. Replicate boundary atoms にチェックが入っている場合は、セル境界に位置する原子をコピーします。
5. Boundary で指定した方法でセル境界を取り直します。
6. ここまでの操作を全てのセルに対して実行します。
7. 接合前のセルにおける分率座標（積層方向を除く）を保持する形ですべてのセルを接合します。接合後のセルのサイズは Interval と In-Plane Axes により決定されます。

Interval
: セル間の距離を指定します（単位はÅ）。

Stacking axis
: 積層する方向を指定します。

Order
: 積層する順番を指定します。

In-Plane Axes
: 界面水平方向のサイズの調整方法を指定します。Average in-plane axes の場合は、全セルの平均値に調整します。Use selected cell axes の場合はその右のプルダウンメニューで選択したセルの値に調整します。

各 cell の+/-ボタン
: セルの数を増減させます。

Type
: Displayed cell の場合は、このセルにメインウィンドウに表示されている構造を読み込みます。File の場合は、このセルに指定したファイルの構造を読み込みます。Vacuum の場合は、このセルを Height に指定した長さの真空層とします（単位はÅ）。

Operations
: 読み込まれたセルに対し次の処理を実行します。

  Reset
  : Operations の設定をリセットします。

  Cleave plane
  : 指定した面方位にセルを取り直します。Config をクリックすると詳細を設定することができます。具体的な操作方法は **スラブを作成** で確認してください。

  Transform by matrix
  : 指定した回転行列を用いてセルを取り直します。Config をクリックすると詳細を設定することができます。具体的な操作方法は **単位格子を変換** で確認してください。Config をクリックする際に、自動的に指定したセルの形状に近い回転行列を検索することもできます。

Shift
界面水平方向の位置を指定します。Config をクリックすると詳細を設定することができます。Align marked atoms をクリックすると、選択した 2 原子の界面水平方向の位置が揃うようにシフト量が自動で決定されます。

Wrapping
セルの外側の原子に対する操作を指定します。Wrap for each molecule の場合は、各分子の重心がセルの内側に来るように周期境界条件を考慮して座標を折りたたみます。Wrap for each atom の場合は、すべての原子がセルの内側に来るように周期境界条件を考慮して座標を折りたたみます。Do nothing の場合は特に操作をしません。

Boundary
積層方向のセルの接合時の境界を指定します。セル間の距離はここで指定した境界の間で計算されます。Cell boundary の場合は、読み込んだセルの境界が接合時の境界となります。Outermost atom の場合は、積層方向の最小および最大の座標を持つ原子の位置が接合時の境界となります。

Replicate boundary atoms
チェックが入っている場合は、積層方向のセル境界に位置する原子を、周期境界条件を考慮して両側にコピーします。

Use conventional cell
チェックが入っており、読み込んだセルが conventional cell に変換可能な場合は、conventional cell に変換した上で処理します。

Lattice Matching
セルが 2 つの場合に、条件を満たす回転行列を自動で算出します。パラメータを調整した後で Search ボタンをクリックします。そして、リストに現れた構造の中から採用したいものにチェックを入れ Apply changes back をクリックします。

OK ボタン
設定された内容に基づき界面モデルを作成します。

旧仕様の機能は次の通りです。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またはメインウィンドウに表示されている構造を接合して界面モデルを作成します。

Cell タブ
界面を挟む 2 相（Cell1 と Cell2）を指定します。

Use displayed cell
メインウィンドウに表示されているモデルを相に指定します。

Load from file
各種形式の構造ファイルからモデルを読み込んでを相に指定します。

Direction タブ

Axis perpendicular to interface
界面垂直方向の軸を指定します。

Order
Cell1 と Cell2 を接合する順番を指定します。

Interval
Cell1 と Cell2 の間隔を指定します。

Specify interval between cell boundaries
入力した値は、セル境界間の距離となります。

Place atoms on cell boundaries on both sides
チェックを入れると、セル境界直上に置かれた原子を、界面垂直方向の両サイドにコ

ピーして配置します。 *Axis perpendicular to interface* が c-axis の場合、c 軸上（直方体セルの場合は z 軸）の分率座標が 0 または 1 の原子は、分率座標がそれぞれ 1 または 0 の位置にコピーされます。

Specify interval on selected axis between outermost atoms
入力した値は、 *Axis perpendicular to interface* で選択した軸上のもっとも外側の原子間の距離となります。

Adjusting cell size parallel to interface
界面水平方向のセルサイズの調整方法を指定します。

Scale both cells to average size
作成される界面モデルの界面水平方向のセルサイズが、Cell1 と Cell2 のセルサイズの平均値となるよう、原子位置をアフィン変形します。

Scale to size of...
選択したセルサイズに、他方のセルサイズを合わせるよう、原子位置をアフィン変形します。

Extend size of smaller cell while keeping atomic positions
原子位置は変更せず、小さい方のセルサイズを大きい方のセルサイズに変更します。

Repeat タブ

Number of cells
界面モデルの作成時に、Cell1 および Cell2 のスーパーセルの個数を指定します。 *Suggest* ボタンをクリックすると、Cell1、Cell2 それぞれどの個数にするとセルサイズの比がいくつになるかを表示します。 *Ratio* が 1 に近い組み合わせを選ぶことが推奨されます。

Operation for atoms outside each cell
セルの外側に位置する原子があった場合の扱いを指定します。

Wrap for each molecule
周期境界を考慮して、分子単位でセルの内側に位置を移動させます。

Wrap for each atom
周期境界を考慮して、原子単位でセルの内側に位置を移動させます。

Do nothing
何もしません。

Build ボタン
設定された内容に基づき界面モデルを作成します。

6.13 *MD* → *LAMMPS* メニュー

LAMMPS に関するメニューです。

6.13.1 LAMMPS の設定方法

LAMMPS をインストールするには、2023/04/05 バージョン以降の CygwinWM をインストールしてください。CygwinWM の `/opt_win/LAMMPS*/bin/` に `lmp_serial.exe` や `lmp_mpi.exe` などが収められています。

Winmostar から LAMMPS を利用するための設定は **ツール → 環境設定 メニュー** で行います。Winmostar V11.5.0 以降を新規インストールし CygwinWM 2023/04/05 バージョン以降を利用する場合は設定不要です。

まず **プログラムパス** → *LAMMPS* で使用する LAMMPS の `lmp_serial.exe` 、 `lmp_mpi.exe` または `lmp.exe` を選択します。(`lmp_serial.exe` を選択して MPI 実行する際には同じフォルダに置かれた `lmp_mpi.exe` が自動で利用されます。) 次に、 **計算** → *mpiexec (LAMMPS)* で *MPICH* を選択するか、 *Select* を選択し使用する MPI の `mpiexec.exe` を選択します。CygwinWM に収められた LAMMPS を使う場合は、CygwinWM の下の `/opt_win/MSMPI/Bin/mpiexec.exe` を選択します。最後に、 **計算** → *Options for mpiexec (LAMMPS)* で **`mpiexec.exe`** の引数を入力します。CygwinWM に収められた LAMMPS を使う場合は、**`-np %WM_NUM_PROC%`** と入力します。

ポテンシャルファイルを追加したい場合は、**ツール → 環境設定 メニュー** → **計算** → *MD* → *LAMMPS* **ポテンシャルフォルダ** → *Open potential directory* をクリックし、開いたフォルダにポテンシャルファイルを追加します。

リモートマシンに 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。

6.13.2 力場を割り当て

力場を設定します。ソルバの種類に応じて、選択肢が変化します。

力場を割り当てた後、割り当てた力場を確認する場合は **情報を見る** を使用します。

LAMMPS の場合、この機能を利用する時点でメインウィンドウに速度を含んだ gro ファイルを開いていると、速度を含んだ data ファイルを生成します。同様に Gromacs の場合、速度を含んだ data ファイルを開いていると、速度を含んだ gro ファイルを生成します。Gromacs および LAMMPS の計算データを速度付きで引き継ぎたいときに有用です。

一度力場を割り当てて MD 計算を実行すると、結合次数が力場パラメータの平衡長から自動判定されます。力場の種類によっては、その際に決定された結合次数が力場割り当て前の結合次数とは異なる場合があります。一部の力場は、結合次数の影響を受けます。力場割り当て前の結合次数に戻したい場合は **結合をファイルから読み込む** を使用してください。

自動でパラメータを割り当て

新たに力場パラメータを割り当てます。分子表示エリア中の結合で互いに連結した構造が 1 つの分子として認識されます。

(一般)

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, GAFF2, OPLS/AA-L+GAFF の場合は **acpype** 、Dreiding の場合は内製プログラム、UFF の場合は OpenBabel を独自に拡張したプログラム、OPLS-AA の場合は mktop が使用されます。OPLS/AA-L+GAFF は非結合ポテンシャル (LJ パラメータ等) を OPLS-AA/L、分子内の結合ポテンシャル (結合、結合角、二面角等) を GAFF で設定します。Dreiding の設定は `polymer/dreiding.lib.txt` に書かれています。UFF の詳細は *Universal Force Field* を確認してください。

Exception

特定の分子または結晶に対し、(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または結晶にチェックを入れ、右の欄で LJ パラメータを入力します。*Automatically assign parameters* をクリックすると、UFF または Dreiding の LJ パラメータが自動で割り当てられます。*Use bond*

coefficient または *Use angle coefficient* にチェックを入れると、その右の欄に入力した係数を用いて結合する原子間の bond または angle に対し、harmonic な bond および angle potential が設定されます。これらはあくまで近似的な分子・結晶を表現するための機能です。*Use bond coefficient* または *Use angle coefficient* を利用しない場合は、ここで指定された分子または結晶を構成する原子は LJ ポテンシャルまたは静電ポテンシャルのみで相互作用し、形状が崩れる場合があります。

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。

(タンパク質)

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。

(水分子)

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。

タンパク質向けに [position_restraints] を追加

タンパク質が存在する場合は *Advanced* 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。

選択原子向けに [position_restraints] を追加

ユーザが指定する分子に対し、 *Advanced* 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。

選択原子向けに [distance/angle/dihedral_restraints] を追加

ユーザが指定する分子に対し、 *Advanced* 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。

割り当て後編集ウィンドウを開く

力場パラメータを自動で割り当てた後、 *Edit Force Field* ウィンドウを開きます。

Edit Force Field ウィンドウ

atoms, bonds, anlges, dihedrals の表中には、Gromacs のフォーマットで力場パラメータを入力します。表中の項目を分子表示エリアから選択したい場合は、まず分子表示エリア中で選択したい原子（bond の場合は bond を構成する 2 原子、angle の場合は angle を構成する 3 原子、以下同様）をクリックした後で *Select item clicked at viewport* をクリックします。

このウィンドウを閉じる際に、bonds の情報から 1-4 ペアを検出し、Gromacs における [pairs] レコードを自動生成します。4 員環、5 員環内の 1-4 ペアについては [pairs] を生成しません。

File メニュー

Import top file

Gromacs の top ファイルを読み込み、表示されている原子に割り当てます。

Export top file

編集中の力場パラメータを Gromacs の top 形式で出力します。

Export mol2 file
表示中の分子構造を mol2 形式で出力します。

Export itp file
編集中の力場パラメータを Gromacs の itp 形式で出力します。

Update using itp file (bond/angle/dihedraltypes)
指定した itp ファイルに書かれた bondtypes, angletypes, dihedraltypes で編集中の力場パラメータを上書きします。

Update using itp file (atom/bond/angle/dihedraltypes)
指定した itp ファイルに書かれた atomtypes, bondtypes, angletypes, dihedraltypes で編集中の力場パラメータを上書きします。

Action メニュー

Complement
現時点で力場パラメータが割り当てられていない自由度に対し、指定した種類の汎用力場を割り当てます。複数の汎用力場を一つの分子に割り当てられてしまうため、その際は計算結果の検証を行ってください。

Assign equilibrium bonds/angles from current structure
現在表示されている分子の結合長・結合角を力場パラメータの平衡長・平衡角に設定します。汎用力場で割り当てられる平衡長・平衡角はその他のパラメータと合わせて注意深くデザインされているため、現在割り当てられている平衡長・平衡角が著しく本来の結合長・結合角から外れている場合のみ使用することを推奨します。

Add undefined dihedrals
dihedrals の表中に定義されていない二面角を追加します。

Duplicate selected item
表中で選択された項目を複製します。periodicity 違いの dihedral パラメータを作成したいときなどに有用です。

Delete selected item
表中で選択された項目を削除します。

Add unused dihedral terms
全ての dihedral に対し指定した periodicity のパラメータを作成したい場合に使います。

Setup pair_style hybrid
LAMMPS の場合のみ使用できます。表示されている分子または結晶のうち、指定した部分に EAM, Tersoff 等のポテンシャルファイルで設定する力場を指定します。

Dump Now
現在の設定に基づき、力場が割り当てられたファイルを生成します。

注釈:

- 力場の情報をテキストエディタ等で編集してカスタマイズしたい場合は、まず *Dump Now* を使用して力場情報を含むファイルを保存し、Gromacs の場合は top、LAMMPS の場合は data ファイルをテキストエディタ等で編集してください。
- 次に、Gromacs の場合は、 **ファイル** → **ファイルをインポート** で gro ファイルをインポートし（ **破棄して読み込み** を選択）、 **力場を割り当て** で **トポロジファイルに書かれたパラメータを使用** を選択して *OK* ボタンをクリックしてください。そして、top ファイルの場所を聞かれるので、先ほど保存・編集した top ファイルを開いてください。

- LAMMPS の場合は、 **ファイル** → **ファイルをインポート** で data ファイルをインポートし（ **破棄して読み込み** を選択）、 **力場を割り当て** で **メインウィンドウのファイルに書かれたパラメータを使用** を選択し *Next* > ボタンをクリックしてください。data ファイルに力場の情報が書かれていない場合は、 **力場の種類を選択してください** と出るので、使用する汎用力場の種類を選択して *OK* ボタンをクリックしてください。
- 電荷はメインウィンドウに表示されている構造から取得されます。メインウィンドウに複数種類の電荷が設定されている場合は（例えば GAMESS のログファイルを開き Mulliken 電荷と Lowdin 電荷が設定されている場合など）、（高優先）User 電荷＞ NBO 電荷＞ Lowdin 電荷＞ ESP 電荷＞ Mulliken 電荷（低優先）の順番に優先され使用されます。

パラメータファイルを使用（無機物、ReaxFF、DPD 向け）
（LAMMPS 向け）無機物用ポテンシャル、ReaxFF または DPD を使用したい場合に選択します。 *Next* > ボタンを押した後に、実際に使用する力場の種類を指定します。pair_style と Potential file をユーザが自由に入力できるようにするためには、[ツール]-[環境設定]-[計算] において設定する必要があります。結果解析用に top ファイルが自動で生成されますが、実際の原子間力パラメータを反映したものではないため注意してください。

トポロジファイルに書かれたパラメータを使用
（Gromacs 向け）既に存在している top ファイルを用いて MD 計算を実行する場合に選択します。メインウィンドウには対応する gro ファイルを開くかインポートしておく必要があります。開くかインポートした後に構造を編集すると top ファイルとの対応が破綻し計算できなくなります。開くかインポートした後に力場情報に影響しない範囲で（例えば結合変更せずに座標だけを編集するなど）構造を編集してから本機能を使いたい場合は、構造の編集後に gro 形式でエクスポートし、そのファイルを開くかインポートしてから本機能を利用してください。

メインウィンドウのファイルに書かれたパラメータを使用
（LAMMPS 向け）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。メインウィンドウには使用する data ファイルを開くかインポートしておく必要があります。開くかインポートした後に構造を編集すると top ファイルとの対応が破綻し計算できなくなります。 *Next* > ボタンを押した後に、使用する力場の種類を指定します。

6.13.3 ワークフロー設定

プロジェクトモードにおける LAMMPS の計算フローを設定、実行します。Preset の 12-Step Compression は [Hofmann2000] , [Larsen2011] に記載されたポリマーの平衡化手順です。また、21-Step Compression-Decompression は [Larsen2011] に記載されたポリマーの平衡化手順です。

Preset
設定のプリセットを呼び出し、保存します。

# of Jobs
ジョブの数を指定します。

Enable parameter/structure scan
この機能を使うためにはアドオンの購入が必要です。特定のパラメータだけが異なる複数の計算を流したり（パラメータスキャン）、複数の構造に対し同一のパラメータで計算を流す（構造スキャン）ことが可能となります。

Config をクリックするとスキャン計算の設定画面が出現します。

パラメータスキャンの際は *Target Variable* に%WM_SCAN1%を選択し、 *Values* の各行に%WM_SCAN1%に設定したいパラメータを入力します。そして、ワークフロー設定ウィンドウまたはキーワード設定ウィンドウにおいて設定したいパラメータに%WM_SCAN1%と入力します。

Values の各行にスペース区切りで値が記入されている場合は、1 列目の値を%WM_SCAN1_1%、2 列目の値を%WM_SCAN1_2%... といった具合に参照することができます。

並列数をスキャンしたい場合は、# of Threads または# of Procs を選択します。

構造スキャンの際は、分子表示エリアでアニメーションが出現した状態（SDF ファイルを開くなど）で、 *Target Variable* に%WM_STRUCT%を選択します。また、構造スキャン実行時には作業フォルダに label_scan_struct.txt というファイル名で、アニメーション表示エリアのリストの文字列が保存されます。

スキャン計算の終了後は **ファイル** → **プロジェクト** → **スキャン結果表示** を利用して計算結果を集計します。

Import
Export で出力した設定を読み込みます。ボタン右の矢印をクリックすると、過去同じプロジェクトまたは Winmostar 上で使用した設定を呼び出すことができます。

Export
設定をファイルに出力します。

OK
設定した内容で計算を実行またはファイルを生成します。詳しくは **プロジェクトモードの場合** を参照してください。

Details
計算条件を詳細に設定します。 **キーワード設定** が立ち上がります。

Ensemble
アンサンブルの種類を指定します。

	設定内容
Minimize	Ensemble=minimize
NVT	Ensemble=nvt
NPT	Ensemble=npt
NPT(aniso)	Ensemble=npt Pressure control=aniso
NPT(z)	Ensemble=npt Pressure control=z
NVE	Ensemble=nve
NPH	Ensemble=nph
NPH(z)	Ensemble=nph Pressure control=z
NPT+Rescale Cell	Ensemble=npt Rescale cell size=True
NVE+Rescale Vel	Ensemble=NVE Rescale velocities=True
NVT(DPD)	Ensemble=nve
NVT(SLLOD)	Ensemble=nvt Reset COM=Disable Enable SLLOD=True

Temperature
温度を指定します。

Pressure
圧力を指定します。

Simulation time
シミュレーション時間を指定します。

# of snapshots
Dump および xtc の出力数を指定します。

Initial velocity
Random の場合は最初に速度をランダムに発生させます。From parent の場合は前のジョブの最終速度を引き継ぎます。

Free boundary condition
周期境界条件ではなく自由境界で計算します。

	設定内容
True	Boundary=fff Neighbor search=nsq Reset COM motion=angular
False	Boundary=ppp Neighbor search=bin Reset COM motion=linear

Precision
計算精度を設定します。

	設定内容
Low	Cutoff(vdW)=10 Cutoff(Coulomb)=10 Log interval=10 Time step(fs)=2 Tchain=3 Pchain=3 Shake tolerance=1e-5 PPPM order=4 K-space accuracy=1-e5
Medium	Cutoff(vdW)=12 Cutoff(Coulomb)=12 Log interval=20 Time step(fs)=1 Tchain=3 Pchain=3 Shake tolerance=1e-6 PPPM order=4 K-space accuracy=1e-6
High	Cutoff(vdW)=15 Cutoff(Coulomb)=15 Log interval=40 Time step(fs)=0.5 Tchain=1 Pchain=1 Shake tolerance=1e-9 PPPM order=6 K-space accuracy=1e-9

6.13.4 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。

電荷が割り当てられていない分子がある場合は、 **自動で電荷を割り当て** が自動で立ち上がります。
力場が割り当てられていない場合は、 **力場を割り当て** が自動で立ち上がります。

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。

Continue 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。各プリセットは以下のキーワードを変更します。

	Minimize (fast)	NVT (fast)	NPT (fast)	NVE (fast)
Pair style	lj/cut/coul/long	lj/cut/coul/long	lj/cut/coul/long	lj/cut/coul/long
Time step		2.0	2.0	2.0
# of time steps	5000	5000	5000	5000
Ensemble	minimize	nvt	npt	nve
Generate initial velocity		True	False	False
Temperature		300	300	
Pressure			1.0	
Boundary Condition	p p p	p p p	p p p	p p p
Reset COM motion	linear	linear	linear	linear
Tchain		3	3	
Pchain			3	
Shake tolerance		1e-5	1e-5	1e-5
Dump interval (dump)	100	100	100	100
Dump interval (xtc)	100	100	100	100
Log interval	10	10	10	10
Cutoff (vdW)	10.	10.	10.	10.
Cutoff (Coulomb)	10.	10.	10.	10.
PPPM order	4	4	4	4
K-space accuracy	1e-5	1e-5	1e-5	1e-5

	Minimize (medium)	NVT (medium)	NPT (medium)	NVE (medium)
Pair style	lj/cut/coul/long	lj/cut/coul/long	lj/cut/coul/long	lj/cut/coul/long
Time step		1.0	1.0	1.0
# of time steps	10000	10000	10000	10000
Ensemble	minimize	nvt	npt	nve
Generate initial velocity		True	False	False
Temperature		300	300	
Pressure			1.0	
Boundary Condition	p p p	p p p	p p p	p p p
Reset COM motion	linear	linear	linear	linear
Tchain		3	3	
Pchain			3	
Shake tolerance		1e-6	1e-6	1e-6
Dump interval (dump)	200	200	200	200
Dump interval (xtc)	200	200	200	200
Log interval	20	20	20	20
Cutoff (vdW)	12.	12.	12.	12.
Cutoff (Coulomb)	12.	12.	12.	12.
PPPM order	4	4	4	4
K-space accuracy	1e-6	1e-6	1e-6	1e-6

	Minimize	NVT	NPT	NVE
Pair style	lj/cut/coul/long	lj/cut/coul/long	lj/cut/coul/long	lj/cut/coul/long
Time step		0.5	0.5	0.5
# of time steps	20000	20000	20000	20000
Ensemble	minimize	nvt	npt	nve
Generate initial velocity		True	False	False
Temperature		300	300	
Pressure			1.0	
Boundary Condition	p p p	p p p	p p p	p p p
Reset COM motion	linear	linear	linear	linear
Tchain		1	1	
Pchain			1	
Shake tolerance		1e-9	1e-9	1e-9
Dump interval (dump)	400	400	400	400
Dump interval (xtc)	400	400	400	400
Log interval	40	40	40	40
Cutoff (vdW)	15.	15.	15.	15.
Cutoff (Coulomb)	15.	15.	15.	15.
PPPM order				
K-space accuracy				

	Minimize (vapor,fast)	NVT (vapor,fast)	NPT (vapor,fast)	NVE (vapor,fast)
Pair style	lj/cut/coul/cut	lj/cut/coul/cut	lj/cut/coul/cut	lj/cut/coul/cut
Time step		2.0	2.0	2.0
# of time steps	5000	5000	5000	5000
Ensemble	minimize	nvt	npt	nve
Generate initial velocity		True	False	False
Temperature		300	300	
Pressure			1.0	
Boundary Condition	f f f	f f f	f f f	f f f
Reset COM motion	angular	angular	angular	angular
Tchain		3	3	
Pchain			3	
Shake tolerance		1e-5	1e-5	1e-5
Dump interval (dump)	100	100	100	100
Dump interval (xtc)	100	100	100	100
Log interval	10	10	10	10
Cutoff (vdW)	10.	10.	10.	10.
Cutoff (Coulomb)	10.	10.	10.	10.
PPPM order				
K-space accuracy				

	Minimize (vapor)	NVT (vapor)	NPT (vapor)	NVE (vapor)
Pair style	lj/cut/coul/cut	lj/cut/coul/cut	lj/cut/coul/cut	lj/cut/coul/cut
Time step		0.5	0.5	0.5
# of time steps	20000	20000	20000	20000
Ensemble	minimize	nvt	npt	nve
Generate initial velocity		True	False	False
Temperature		300	300	
Pressure			1.0	
Boundary Condition	f f f	f f f	f f f	f f f
Reset COM motion	angular	angular	angular	angular
Tchain		1	1	
Pchain			1	
Shake tolerance		1e-9	1e-9	1e-9
Dump interval (dump)	400	400	400	400
Dump interval (xtc)	400	400	400	400
Log interval	40	40	40	40
Cutoff (vdW)	15.	15.	15.	15.
Cutoff (Coulomb)	15.	15.	15.	15.
PPPM order	6	6	6	6
K-space accuracy	1e-9	1e-9	1e-9	1e-9

	Minimize (ReaxFF)	NVT (ReaxFF)	NPT (ReaxFF)	NVE (ReaxFF)
Pair style	reax/c	reax/c	reax/c	reax/c
Time step		0.5	0.5	0.5
# of time steps	20000	20000	20000	20000
Ensemble	minimize	nvt	npt	nve
Generate initial velocity		True	False	False
Temperature		300	300	
Pressure			1.0	
Boundary Condition	p p p	p p p	p p p	p p p
Reset COM motion	linear	linear	linear	linear
Tchain		1	1	
Pchain			1	
Shake tolerance		1e-9	1e-9	1e-9
Dump interval (dump)	400	400	400	400
Dump interval (xtc)	400	400	400	400
Log interval	40	40	40	40
Cutoff (vdW)	15.	15.	15.	15.
Cutoff (Coulomb)	15.	15.	15.	15.
PPPM order				
K-space accuracy				

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。lj/cut/coul/long で boundary が ppf の時には kspace_modify slab 3 というコマンドが自動で追加され、2 次元周期境界条件を考慮した PPPM 法での計算が実行されます。

Force Field/Potential File
Units が real の場合には、力場の種類を指定します。special_bonds, bond_style, angle_style, dihedral_style, improper_style キーワードに影響します。

Units が real 以外の場合には、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 *Units* および *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。

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）, `minimize(variable cell)`（セルサイズの最適化も含めたエネルギー最小化）, `nve/limit`（nve と同様だが移動距離に制限あり）のいずれかを選択します。nve/limit は構造最適化（minimize）の代替手段として利用されます。

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

Random Seed
初速度発生時の擬似乱数の種を指定します。

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。

Tdamp
温度制御の時定数パラメータを指定します。

Use berendsen thermostat
fix nvt または npt ではなく fix temp/berendsen を使って温度制御を行います。

Use velocity rescaling
fix nvt または npt ではなく fix temp/rescaling を使って温度制御を行います。

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

Pressure
目標圧力を指定します。

Pdamp
圧力制御の時定数パラメータを指定します。

Use berendsen barostat
fix nph または npt ではなく fix press/berendsen を使って圧力制御を行います。

Advanced

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。pair_style が lj/cut/coul/long の時に boundary が ppf となっている場合は、kspace_modify slab 3 というコマンドが自動で追加され、2 次元周期境界条件を考慮した PPPM 法での計算が実行されます。

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。

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。xy の場合は x 方向と y 方向のみ重心運動を凍結し、z 方向については凍結しません。

Reset Interval
Reset COM Motion の頻度をタイムステップで指定します

Max distance for nve/limit
Ensemble=nve/limit における 1 ステップあたりの最大移動距離を指定します。

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。

Velocity rescaling interval
速度スケーリングを適用する頻度を指定します。

Velocity rescaling window
速度スケーリングを適用する際の window（設定温度からの許容範囲）を指定します。

Velocity rescaling fraction
速度スケーリングを適用する際の fraction を指定します。1.0 の場合は適用直後に設定温度に一致します。

Control temperature of specific group only
特定グループの温度のみを制御します。予め **登録グループを選択** で温度制御対象とするグループを登録しておいた状態で *Select Group* ボタンを押し、そのグループを選択します。

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

SHAKE tolerance
SHAKE 法の打ち切り誤差を指定します。

Automatically disable Shake if CH4-like molecule exists
メタン状の分子が含まれている時に自動で SHAKE 法を無効にします。

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

Enable dynamic load balancing
ダイナミックロードバランシング（動的負荷分散）を有効にします。

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。

Dump Interval (restart)
restart ファイル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。

Print log in high precision
log ファイルに書き出すエネルギー変数の桁数を増やします。

Sort dump file by id
dump ファイル内の粒子の並びを id（通し番号）でソートされた形にします。

Flush log
ログ出力時に都度 flush します。

Include velocities in dump custom
dump 形式で出力する際に速度も出力します。

Include forces in dump custom (minimize only)
Ensemble=minimize の時のみ、dump 形式で出力する際に力も出力します。

Extra variables for log
thermo_style に任意の変数を追加します。

Dump interval (dipole)
系全体のダイポールモーメントの時系列データを出力する頻度をタイムステップ数で指定します。

Calculate Fluctuation Properties
熱力学量の揺らぎから比熱と等温圧縮率を on-the-fly で計算し出力します。 **エネルギー変化** 機能において v_Cvm を選択すると定積比熱の積算平均値、v_Cpm を選択すると定圧比熱の積算平均値、v_betat を選択すると等温圧縮率の積算平均値を表示できます。

Calculate Thermal Conductivity
原子の流速の自己相関関数と Green-Kubo 式から熱伝導率を on-the-fly で計算し出力します。この方法では fix ave/correlate コマンドを使うため自己相関関数の長さは固定長となります。 **エネルギー変化** 機能において v_kappa を選択するとそれまでの時間で得られた熱伝導率を表示できます。

Calc interval
自己相関関数の算出頻度を指定します。

ACF length
自己相関関数の長さを指定します。自己相関関数の最大時間は (Calc Interval) × (ACF Length) × (Time Step) となります。

Calculate viscosity
圧力テンソルの自己相関関数と Green-Kubo 式から粘度を on-the-fly で計算し出力します。この方法では fix ave/correlate コマンドを使うため自己相関関数の長さは固定長となります。 **エネルギー変化** 機能において v_eta を選択するとそれまでの時間で得られた粘度を表示できます。

Calc interval
自己相関関数の算出頻度を指定します。

ACF length
自己相関関数の長さを指定します。自己相関関数の最大時間は (Calc Interval) × (ACF Length) × (Time Step) となります。

Calculate heat flux relaxation
原子の熱流の自己相関関数を出力します。この方法では fix ave/correlate/long コマンド（multiple-tau correlator）を利用するためシミュレーション時間に応じて自動的に長時間の自己相関関数を取得できます。熱伝導率は別途ポスト処理から計算することができます。

Calc interval
自己相関関数の算出頻度を指定します。

Dump Interval
自己相関関数の出力頻度を指定します。

Calculate stress relaxation
圧力テンソルの自己相関関数を出力します。この方法では fix ave/correlate/long コマンド（multiple-tau correlator）を利用するためシミュレーション時間に応じて自動的に長時間の自己相関関数を取得できます。粘度は別途ポスト処理から計算することができます。

Calc interval
自己相関関数の算出頻度を指定します。

Dump Interval
自己相関関数の出力頻度を指定します。

Calculate dipole relaxation
系全体のダイポールモーメントの自己相関関数を出力します。この方法では fix ave/correlate/long コマンド（multiple-tau correlator）を利用するためシミュレーション時間に応じて自動的に長時間の自己相関関数を取得できます。

Calc interval
自己相関関数の算出頻度を指定します。

Dump Interval
自己相関関数の出力頻度を指定します。

Output (2)

Dump velocity profile along
指定した軸方向の平均速度分布を出力します。出力結果は **軸方向速度分布** にて確認できます。

Calc Interval
平均速度分布算出における速度のサンプリング間隔を指定します。

Dump Inteval
平均速度分布の出力頻度を指定します。

Slab width
平均速度分布算出時の空間平均する厚みを指定します。

Target
平均速度分布算出においてサンプルする速度の方向を選択します。

Interaction

Modify cutoff radii not to exceed L/2
チェックを入れた場合は、Cutoff (vdw), Cutoff (Coulomb) が格子定数の半分を超えないように自動調整します。

Include dispersion/d3 if units=metal
units=metal の時に D3 補正を追加します。pair_style hybrid を利用します。Damping で damping 関数の種類、Functional で交換相関汎関数の種類、Cutoff (global) で global なカットオフ半径、Cutoff (coord) で配位数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。

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

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。

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。

Disable Ewald(PPPM) if no charge exists
系が電荷を持たない場合に、自動で Ewald（PPPM）法を無効にします。

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。

Non-equiliibrium (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す。 **エネルギー変化** 機能において v_EngStrain を選択すると工学ひずみを表示できます。

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 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
予め **登録グループを選択** で Pull したい原子を登録しておいた状態で *Select Group* ボタンを押し、そのグループを選択します。

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

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 pressurization
圧縮計算（圧力を一定速度で変化させる計算）を有効にします。 *Ensemble* が `npt` , `nph` の時に指定できます。 *Pressure* の値が始状態の圧力、 *Final Pressure* の値が終状態の圧力となります。

Final Pressure
圧縮計算時の終状態の圧力を指定します。

Enable electric field
外部電場を与えます。 *Sine wave* を選ぶと、Sin 関数で電場を与えます。 *Cosine wave* を選ぶと、Cos 関数で電場を与えます。 *Constant* を選ぶと、定常的に電場を与えます。 **エネルギー変化** において本機能で与えた電場を v_efieldx, v_efieldy, v_efieldz、その応答である系全体のダイポールモーメントを v_dipolex, v_dipoley, v_dipolez で表示することができます。

Amp & Freq
各方向の強度（Amp）と周波数（Freq）を与えます。 *Enable electric field* で *Sine wave* または *Cosine wave* を選んだ時は下式で電場が与えられ、A が強度、f が周波数 (単位は 1/fs=PHz、ペタヘルツ) となります。 *Constant* を選んだ時は強度のみが使われます。

$$A\sin(2\pi ft) or A\cos(2\pi ft)$$

Non-equiliibrium (2)

Enable adding force
Target atoms で指定した原子に-z 方向の力を加えます。加える力は *Target Pzz* とシミュレーションセルの XY 平面の面積の値です。固液界面系において、固体（スラブ）に力を加え、系全体の圧力を調整したいときに有用です。力を加える原子の z 方向の重心位置は

thermo_style に v_GrpAddForceCOMz という変数で出力されるので、**エネルギー変化** でモニタリングすることができます。制御がうまくいかない場合は Target Pzz を高め（10000 atm など）に設定した後徐々に小さくするとうまくいく場合があります。また、単層グラフェンのような構造を Target atoms に指定すると計算が破綻することがあるので、スラブの上端や下端など一部の原子だけを Target atoms に指定することを推奨します。

Target atoms
予め **登録グループを選択** で力を加えたい原子を登録しておいた状態で *Select Group* ボタンを押し、そのグループを選択します。

Target Pzz
Enable adding force で加える力を指定します。

Enable direct density control
シミュレーションセルを、最終ステップにおいて密度が *Density at final step* の値になるよう、強制的に線形に変形します。変形は相似的に行われます。圧力制御が安定しないが系をある程度圧縮したいときに有用です。

Density at final step
Enable direct density control 機能における最終ステップの密度を指定します。

Enable SLLOD method
SLLOD 法の計算を有効にします。 **エネルギー変化** 機能において v_etane を選択すると粘度の瞬時値、v_tempSLLOD を選択すると SLLOD 法のバイアスを除いた温度の瞬時値を表示できます。

Shear strain rate
SLLOD 法計算時のせん断速度を指定します。

Divide # of time steps by shear strain rate
時間積分ステップ数を shear strain rate で割った値に設定します。shear strain rate を変えた計算を流すときに本機能を使うと、# of time steps を明示的に変更することなく、高 shear strain rate の場合はステップ数を小さく、低 shear strain rate の場合はステップ数を大きくすることが可能です。

Pulling with thermostat
指定した原子グループを熱浴で熱運動させながら平均的な位置または速度に制御します。Restraint や Pulling 機能では制御対象のグループの温度が 0 K となりますが、本機能では指定した温度で制御することができます。 **エネルギー変化** 機能において v_PullTherm*_rx, v_PullTherm*_ry, v_PullTherm*_rz を選択すると制御対象のグループの重心の x, y, z 座標、v_PullTherm*_vx, v_PullTherm*_vy, v_PullTherm*_vz を選択すると制御対象のグループの重心の x, y, z 方向の速度、v_PullTherm*_fx, v_PullTherm*_fy, v_PullTherm*_fz を選択すると制御対象のグループの重心の x, y, z 方向の力、v_TempPullTherm*COM を選択すると制御対象のグループの温度の瞬時値を表示できます。

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
Set ボタンをクリックすると、マーカーが付いた 2 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。固定されていない原子の温度は log に TempFree として出力されます。

Restrained Atoms
予め **登録グループを選択** で拘束したい原子を登録しておいた状態で *Select Group* ボタンを押し、そのグループを選択します。

Use spring potential
Restrained Atoms に指定した原子を初期位置からのばねポテンシャルで拘束します。 *Reset positions of restrained atoms after run* にチェックが入った場合は、計算終了後は初期位置に戻されるため、Continue simulation を繰り返しても最初に指定した位置から離れて移動することはありません。

Spring constant
ばねポテンシャルを使う際のばね係数を指定します。

Reset positions of restrained atoms after run
ばねポテンシャルを使う際、計算終了後に拘束した原子の位置を初期位置に戻します。

Enable position restraint for opt-flagged atoms
メインウィンドウで指定された最適化フラグに基づいて原子位置を拘束します。

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 cell 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。

Additional Commands
read_data の行の直前、各種 fix コマンドの直後、run（または minimize）の行の直前、および run（または minimize）の行の直後に任意のコマンドを追加します。

Manual entry
生成される LAMMPS のインプットスクリプト (in ファイル) の中身が表示されます。この場所で直接編集することも可能です。ここに追記した内容は、ほかのキーワードを編集すると破棄されます。破棄されることを回避したい場合は、Additional Commands に記入します。

Options

Restore Working Folder
継続ジョブが異常終了時など、作業フォルダ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。

Generate gro & ndx files every time
チェックが入っていない場合は、継続ジョブの時に gro と ndx ファイルを生成しません。

Extra File
Add をクリックして選択したファイルが作業フォルダにコピーされます。Clear をクリックすると Add したファイルをクリアできます。

Reset
設定をリセットします。

Import
設定ファイルを読み込みます。

Export
設定ファイルを出力します。

6.13.5 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） *Continue Simulation* にチェックがなく、 力場を割り当て において 自動でパラメータを割り当て または パラメータファイルを使用（無機物、*ReaxFF*、*DPD* 向け） を選択した場合**
  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。
- ***Continue Simulation* にチェックがなく、 力場を割り当て において メインウィンドウのファイルに書かれたパラメータを使用 を選択した場合**
  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。
- ***Continue 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フォルダの中にある `lmp_tmp_final.data` 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。
作業フォルダ `water_lmp_tmp\`	作業フォルダです。

作業フォルダ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.data	read_data で指定される計算の初期状態のファイルです。
lmp.in	計算条件を指定するファイルです。
lmp.log	ログファイルです。 water.log と同じものです。
lmp.dump	dump 形式のトラジェクトリファイルです。
lmp.restart	最終状態の情報を含む restart ファイルです。
lmp_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.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.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。 入力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。
lmp.top	結果処理に Gromacs ツールを使用するための top 形式の座標ファイルです。 入力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：作業フォルダ

- 作業フォルダとは、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、作業フォルダの名前は `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フォルダ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フォルダ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、作業フォルダが `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。**

ジョブは *Winmostar Job Manager* を通じて実行されます。

6.13.6 ログを表示

LAMMPS のログファイル（ `*.log` ）をテキストエディタで開きます。

6.13.7 ログの抜粋を表示

ログファイルの主要な情報を抜粋して表示します。

6.13.8 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 **アニメーション操作エリア** を参照してください。

ReaxFF などの化学結合の変化が起きる計算の場合、アニメーション操作エリアで *Options* → *Enable Dynamics Bond* にチェックを入れると、毎ステップ結合距離から結合の有無が判定され結合の変化の様子を確認することができます。

アニメーション操作エリアで Open Viewer をクリックし、Winmostar Viewer で *View* → *Representations* で *Color* を Property に変更すると、エネルギー最小化（minimize）計算の場合は各原子に掛かる力の絶対値の常用対数、それ以外の場合は各原子の速度の絶対値をカラーで表示することができます。

6.13.9 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。v_logFn はエネルギー極小化（minimize）計算における力の最大値の常用対数です。

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。

6.13.10 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。

6.13.11 結果解析

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。

自己拡散係数/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 **自己拡散係数/平均二乗変位** を参照してください。

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。

全並進運動量

LAMMPS が出力した xtc ファイルと Winmostar が自動生成した gro, ndx, mdp, top, data, dump ファイルを選択し、系全体の並進運動量を表示します。

詳細は **全並進運動量** を参照してください。

速度分布

LAMMPS が出力した xtc, dump ファイルと Winmostar が自動生成した gro, ndx, mdp, top, data ファイルを選択し、速度分布を表示します。

詳細は **速度分布** を参照してください。

速度相関/振動スペクトル

LAMMPS が出力した xtc ファイルと Winmostar が自動生成した gro, ndx, mdp, top 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。

詳細は **速度相関/振動スペクトル** を参照してください。

比誘電率/双極子モーメント

LAMMPS が出力した xtc ファイルと Winmostar が自動生成した gro, ndx, mdp, top ファイルを選択し、比誘電率または双極子モーメントの分布・ヒストグラムを表示します。

詳細は **比誘電率/双極子モーメント** を参照してください。

密度分布

LAMMPS が出力した xtc ファイルと Winmostar が自動生成した gro, ndx, mdp, top ファイルを選択し、密度分布を表示します。

詳細は **密度分布** を参照してください。

自由体積

LAMMPS が出力した xtc ファイルと Winmostar が自動生成した gro, ndx, mdp, top ファイルを選択し、自由体積を表示します。

詳細は **自由体積** を参照してください。

軸方向速度分布

LAMMPS が出力した軸方向の平均速度分布の情報ファイルを選択し、軸方向の速度分布を表示します。

各種自己相関関数 (ave/correlate)

Green-Kubo 式を用いた熱伝導率、粘度算出時に出力される、fix ave/correlate コマンドで作成された自己相関関数を表示します。

各種自己相関関数 (ave/correlate/long)

fix ave/correlate/long コマンドで作成された自己相関関数を表示します。

Hildebrand 溶解度パラメータ

LAMMPS が出力した log, data 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。DPD パラメータの算出に必要な圧縮率を取得するには、読み込む LAMMPS のファイルが出力された計算において、Calculate Fluctuation Properties にチェックが入っている必要があります。

χ/DPD パラメータ

LAMMPS が出力した log, data ファイルから、χ パラメータ・DPD aij 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。

距離/角度/二面角分布

LAMMPS が出力した xtc ファイルと Winmostar が自動生成した gro, ndx, mdp, top ファイルを選択し、選択グループ間の距離、角度、または二面角の分布を表示します。

詳細は **距離/角度/二面角分布** を参照してください。

水素結合解析

LAMMPS が出力した xtc ファイルと Winmostar が自動生成した gro, ndx, mdp, top ファイルを選択し、選択グループ間の水素結合を解析します。

詳細は **水素結合解析** を参照してください。

慣性半径

LAMMPS が出力した xtc ファイルと Winmostar が自動生成した gro, ndx, mdp, top ファイルを選択し、選択グループの慣性半径を解析します。

詳細は **慣性半径** を参照してください。

原子/グループ間距離変化

LAMMPS が出力した xtc ファイルと Winmostar が自動生成した gro, ndx, mdp, top ファイルを選択し、特定原子間または特定原子グループ間の距離の変化を解析します。

詳細は **原子/グループ間距離変化** を参照してください。

粘度

Multiple tau correlator (fix ave/correlate/long) で取得した応力の自己相関関数から粘度を計算します。上段のグラフには規格化した自己相関関数 C(t)/C(0) が対数-線形プロットで表示され、中段のグラフには対数-対数プロットで表示され、下段のグラフには自己相関関数の積算値から得られる粘度が表示されています。 *Fit to ACF & estimate viscosity* にチェックが入っている場合、自己相関関数のプロットには、緑色で下式にフィッティングした関数が表示されています。

$$f(x) = A_1 \exp(-(x/B_1)^{C_1}) \cos(D_1 x) + (1 - A_1) \exp(-(x/B_2)^{C_2})$$

下段のグラフにおいて、短時間側は積分範囲が不十分であることによる誤差が大きく、長時間側は自己相関関数のサンプリング不足による誤差が大きいです。

また、フィッティングした関数が *Threshold for switching integration from raw to fitted* に入力した値を下回る時間（ただし短時間の振動成分を除く）が *Switch integration at* に表示されます。 *Estimated Viscosity* には、自己相関関数を台形公式で積分して得られた粘度が表示されています。ただしその数値積分は、 *Switch integration at* の時間を境に、短時間側は計算から直接得られた自己相関関数について、長時間側は上式にフィッティングした関数について積分されます。上式でのフィッティングが良好な場合は、長時間側を上式にフィッティングした関数について積分することにより、サンプリング不足による誤差の影響を軽減させることができます。フィッティングが良好でない場合は下段のグラフの値から直接粘度を読み取ります。

Plot Autocorrelation Function にチェックが入っていない場合は自己相関関数の積算値から得られる粘度のみがプロットされます。グラフの Options から区間平均を求める際に有用です。

熱伝導度

Multiple tau correlator (fix ave/correlate/long) で取得した熱流の自己相関関数から熱伝導率を計算します。上段のグラフには規格化した自己相関関数 C(t)/C(0) が対数-線形プロットで表示され、中段のグラフには対数-対数プロットで表示され、下段のグラフには自己相関関数の積算値から得られる熱伝導度が表示されています。自己相関関数のプロットには、緑色で下式にフィッティングした関数が表示されています。

$$f(x) = A_1 \exp(-(x/B_1)^{C_1}) \cos(D_1 x) + (1 - A_1) \exp(-(x/B_2)^{C_2})$$

下段のグラフにおいて、短時間側は積分範囲が不十分であることによる誤差が大きく、長時間側は自己相関関数のサンプリング不足による誤差が大きいです。

また、フィッティングした関数が *Threshold for switching integration from raw to fitted* に入力した値を下回る時間（ただし短時間の振動成分を除く）が *Switch integration at* に表示されます。 *Estimated Viscosity* には、自己相関関数を台形公式で積分して得られた熱伝導度が表示されています。ただしその数値積分は、 *Switch integration at* の時間を境に、短時間側は計算から直接得られた自己相関関数について、長時間側は上式にフィッティングした関数について積分されます。長時間側を上式にフィッティングした関数について積分することにより、サンプリング不足による誤差の影響を軽減させることができます。

6.13.12 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。

Reset
すべての設定をデフォルトに戻します。

Monomers Available
ポリマー鎖を構成するモノマー（粒子）を選択します。

>> Add >>
選択したモノマーを追加します。

<< Delete <<
追加したモノマーを削除します。

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。

>> 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。

<< Delete <<
追加したポリマー鎖を削除します。

Export
Monomer Used の内容をファイルに出力します。

Import
Monomer Used の内容をファイルから読み込みます。

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。

Build
無次元密度を入力し、シミュレーションセルを構築します。

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。

Gamma
摩擦係数（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-タをポテンシャルファイルに保存してウィンドウを閉じます。

Close
設定内容を破棄してウィンドウを閉じます。

6.14 *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 *CygwinWM のセットアップ* が必要です。

6.14.1 力場を割り当て

力場を設定します。ソルバの種類に応じて、選択肢が変化します。

力場を割り当てた後、割り当てた力場を確認する場合は **情報を見る** を使用します。

LAMMPS の場合、この機能を利用する時点でメインウィンドウに速度を含んだ gro ファイルを開いていると、速度を含んだ data ファイルを生成します。同様に Gromacs の場合、速度を含んだ data ファイルを開いていると、速度を含んだ gro ファイルを生成します。Gromacs および LAMMPS の計算データを速度付きで引き継ぎたいときに有用です。

一度力場を割り当てて MD 計算を実行すると、結合次数が力場パラメータの平衡長から自動判定されます。力場の種類によっては、その際に決定された結合次数が力場割り当て前の結合次数とは異なる場合があります。一部の力場は、結合次数の影響を受けます。力場割り当て前の結合次数に戻したい場合は **結合をファイルから読み込む** を使用してください。

自動でパラメータを割り当て

新たに力場パラメータを割り当てます。分子表示エリア中の結合で互いに連結した構造が 1 つの分子として認識されます。

(一般)

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, GAFF2, OPLS/AA-L+GAFF の場合は **acpype** 、Dreiding の場合は内製プログラム、UFF の場合は OpenBabel を独自に拡張したプログラム、OPLS-AA の場合は mktop が使用されます。OPLS/AA-L+GAFF は非結合ポテンシャル (LJ パラメータ等) を OPLS-AA/L、分子内の結合ポテンシャル (結合、結合角、二面角等) を GAFF で設定します。Dreiding の設定は `polymer/dreiding.lib.txt` に書かれています。UFF の詳細は *Universal Force Field* を確認してください。

Exception

特定の分子または結晶に対し、(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または結晶にチェックを入れ、右の欄で LJ パラメータを入力します。*Automatically assign parameters* をクリックすると、UFF または Dreiding の LJ パラメータが自動で割り当てられます。*Use bond coefficient* または *Use angle coefficient* にチェックを入れると、その右の欄に入力した係数を用いて結合する原子間の bond または angle に対し、harmonic な bond および angle potential が設定されます。これらはあくまで近似的な分子・結晶を表現するための機能です。*Use bond coefficient* または *Use angle coefficient* を利用しない場合は、ここで指定された分子または結晶を構成する原子は LJ ポテンシャルまたは静電ポテンシャルのみで相互作用し、形状が崩れる場合があります。

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。

(タンパク質)

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。

(水分子)

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。

タンパク質向けに [position_restraints] を追加
タンパク質が存在する場合は *Advanced* 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。

選択原子向けに [position_restraints] を追加
ユーザが指定する分子に対し、 *Advanced* 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。

選択原子向けに [distance/angle/dihedral_restraints] を追加
ユーザが指定する分子に対し、 *Advanced* 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。

割り当て後編集ウィンドウを開く
力場パラメータを自動で割り当てた後、 *Edit Force Field* ウィンドウを開きます。

Edit Force Field ウィンドウ
atoms, bonds, anlges, dihedrals の表中には、Gromacs のフォーマットで力場パラメータを入力します。表中の項目を分子表示エリアから選択したい場合は、まず分子表示エリア中で選択したい原子（bond の場合は bond を構成する 2 原子、angle の場合は angle を構成する 3 原子、以下同様）をクリックした後で *Select item clicked at viewport* をクリックします。

このウィンドウを閉じる際に、bonds の情報から 1-4 ペアを検出し、Gromacs における [pairs] レコードを自動生成します。4 員環、5 員環内の 1-4 ペアについては [pairs] を生成しません。

File メニュー

Import top file
Gromacs の top ファイルを読み込み、表示されている原子に割り当てます。

Export top file
編集中の力場パラメータを Gromacs の top 形式で出力します。

Export mol2 file
表示中の分子構造を mol2 形式で出力します。

Export itp file
編集中の力場パラメータを Gromacs の itp 形式で出力します。

Update using itp file (bond/angle/dihedraltypes)
指定した itp ファイルに書かれた bondtypes, angletypes, dihedraltypes で編集中の力場パラメータを上書きします。

Update using itp file (atom/bond/angle/dihedraltypes)
指定した itp ファイルに書かれた atomtypes, bondtypes, angletypes, dihedraltypes で編集中の力場パラメータを上書きします。

Action メニュー

Complement
現時点で力場パラメータが割り当てられていない自由度に対し、指定した種類の汎用力場を割り当てます。複数の汎用力場を一つの分子に割り当てられてしまうため、その際は計算結果の検証を行ってください。

Assign equilibrium bonds/angles from current structure
現在表示されている分子の結合長・結合角を力場パラメータの平衡長・平衡角に設定しま

す。汎用力場で割り当てられる平衡長・平衡角はその他のパラメータと合わせて注意深くデザインされているため、現在割り当てられている平衡長・平衡角が著しく本来の結合長・結合角から外れている場合のみ使用することを推奨します。

Add undefined dihedrals
dihedrals の表中に定義されていない二面角を追加します。

Duplicate selected item
表中で選択された項目を複製します。periodicity 違いの dihedral パラメータを作成したいときなどに有用です。

Delete selected item
表中で選択された項目を削除します。

Add unused dihedral terms
全ての dihedral に対し指定した periodicity のパラメータを作成したい場合に使います。

Setup pair_style hybrid
LAMMPS の場合のみ使用できます。表示されている分子または結晶のうち、指定した部分に EAM, Tersoff 等のポテンシャルファイルで設定する力場を指定します。

Dump Now
現在の設定に基づき、力場が割り当てられたファイルを生成します。

注釈:

- 力場の情報をテキストエディタ等で編集してカスタマイズしたい場合は、まず *Dump Now* を使用して力場情報を含むファイルを保存し、Gromacs の場合は top、LAMMPS の場合は data ファイルをテキストエディタ等で編集してください。
- 次に、Gromacs の場合は、 **ファイル** → **ファイルをインポート** で gro ファイルをインポートし（ **破棄して読み込み** を選択）、 **力場を割り当て** で **トポロジファイルに書かれたパラメータを使用** を選択して *OK* ボタンをクリックしてください。そして、top ファイルの場所を聞かれるので、先ほど保存・編集した top ファイルを開いてください。
- LAMMPS の場合は、 **ファイル** → **ファイルをインポート** で data ファイルをインポートし（ **破棄して読み込み** を選択）、 **力場を割り当て** で **メインウィンドウのファイルに書かれたパラメータを使用** を選択し *Next* > ボタンをクリックしてください。data ファイルに力場の情報が書かれていない場合は、 **力場の種類を選択してください** と出るので、使用する汎用力場の種類を選択して *OK* ボタンをクリックしてください。
- 電荷はメインウィンドウに表示されている構造から取得されます。メインウィンドウに複数種類の電荷が設定されている場合は（例えば GAMESS のログファイルを開き Mulliken 電荷と Lowdin 電荷が設定されている場合など）、（高優先）User 電荷＞ NBO 電荷＞ Lowdin 電荷＞ ESP 電荷＞ Mulliken 電荷（低優先）の順番に優先され使用されます。

パラメータファイルを使用（無機物、ReaxFF、DPD 向け）
（LAMMPS 向け）無機物用ポテンシャル、ReaxFF または DPD を使用したい場合に選択します。 *Next* > ボタンを押した後に、実際に使用する力場の種類を指定します。pair_style と Potential file をユーザが自由に入力できるようにするためには、[ツール]-[環境設定]-[計算] において設定する必要があります。結果解析用に top ファイルが自動で生成されますが、実際の原子間力パラメータを反映したものではないため注意してください。

トポロジファイルに書かれたパラメータを使用
（Gromacs 向け）既に存在している top ファイルを用いて MD 計算を実行する場合に選択します。メインウィンドウには対応する gro ファイルを開くかインポートしておく必要があります。開くかインポートした後に構造を編集すると top ファイルとの対応が破綻し計算できなくなります。開くかインポートした後

に力場情報に影響しない範囲で（例えば結合変更せずに座標だけを編集するなど）構造を編集してから本機能を使いたい場合は、構造の編集後に gro 形式でエクスポートし、そのファイルを開くかインポートしてから本機能を利用してください。

メインウィンドウのファイルに書かれたパラメータを使用
（LAMMPS 向け）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。メインウィンドウには使用する data ファイルを開くかインポートしておく必要があります。開くかインポートした後に構造を編集すると top ファイルとの対応が破綻し計算できなくなります。 *Next* > ボタンを押した後に、使用する力場の種類を指定します。

6.14.2 ワークフロー設定

プロジェクトモードにおける Gromacs の計算フローを設定、実行します。Preset の 12-Step Compression は [Hofmann2000_2] , [Larsen2011_2] に記載されたポリマーの平衡化手順です。また、21-Step Compression-Decompression は [Larsen2011_2] に記載されたポリマーの平衡化手順です。

Preset
設定のプリセットを呼び出し、保存します。

# of Jobs
ジョブの数を指定します。

Enable parameter/structure scan
この機能を使うためにはアドオンの購入が必要です。特定のパラメータだけが異なる複数の計算を流したり（パラメータスキャン）、複数の構造に対し同一のパラメータで計算を流す（構造スキャン）ことが可能となります。

Config をクリックするとスキャン計算の設定画面が出現します。

パラメータスキャンの際は *Target Variable* に%WM_SCAN1%を選択し、 *Values* の各行に%WM_SCAN1%に設定したいパラメータを入力します。そして、ワークフロー設定ウィンドウまたはキーワード設定ウィンドウにおいて設定したいパラメータに%WM_SCAN1%と入力します。Values の各行にスペース区切りで値が記入されている場合は、1 列目の値を%WM_SCAN1_1%、2 列目の値を%WM_SCAN1_2%... といった具合に参照することができます。

並列数をスキャンしたい場合は、# of Threads または# of Procs を選択します。

構造スキャンの際は、分子表示エリアでアニメーションが出現した状態（SDF ファイルを開くなど）で、 *Target Variable* に%WM_STRUCT%を選択します。また、構造スキャン実行時には作業フォルダに label_scan_struct.txt というファイル名で、アニメーション表示エリアのリストの文字列が保存されます。

スキャン計算の終了後は **ファイル** → **プロジェクト** → **スキャン結果表示** を利用して計算結果を集計します。

Import
Export で出力した設定を読み込みます。ボタン右の矢印をクリックすると、過去同じプロジェクトまたは Winmostar 上で使用した設定を呼び出すことができます。

Export
設定をファイルに出力します。

OK
設定した内容で計算を実行またはファイルを生成します。詳しくは **プロジェクトモードの場合** を参照してください。

Details
計算条件を詳細に設定します。 **キーワード設定** が立ち上がります。

Ensemble
アンサンブルの種類を指定します。ただし、tcoupl は Precision が High, Medium の時は nose-hoover に強制的に設定され、pcoupl は Precision が Low の時は berendsen に強制的に設定されます。

	設定内容
Minimize	integrator=steep tcoupl=no pcoupl=no
Minimize(NMA)	integrator=l-bfgs tcoupl=no pcoupl=no emtol=0.01 -DFLEXIBLE=True
NVT	integrator=md tcoupl=berendsen pcoupl=no
NPT	integrator=md tcoupl=berendsen pcoupl=parrinello-rahman pcoupltype=isotropic
NPT(aniso)	integrator=md tcoupl=berendsen pcoupl=parrinello-rahman pcoupltype=anisotropic
NPT(z)	integrator=md tcoupl=berendsen pcoupl=parrinello-rahman pcoupltype=semiisotropic
NVE	integrator=md tcoupl=no pcoupl=no
NPH	integrator=md tcoupl=no pcoupl=parrinello-rahman pcoupltype=isotropic

Temperature
温度を指定します。

Pressure
圧力を指定します。

Simulation time
シミュレーション時間を指定します。

# of snapshots
trr ファイルへの座標・速度の出力回数を指定します。

Initial velocity
Random の場合は最初に速度をランダムに発生させます。From parent の場合は前のジョブの最終速度を引き継ぎます。

Free boundary condition
周期境界条件ではなく自由境界で計算します。

	設定内容
True	pbc=no coulombtype=cut-off nstlist=1 ns-type=simple cutoff-scheme=group Use buffer-tolerance=False comm-mode=angular
False	pbc=xyz coulombtype=pme nstlist=10 ns-type=grid cutoff-scheme=verlet Use buffer-tolerance=True comm-mode=linear

Precision
計算精度を設定します。ただし constraints は、Ensemble が Minimize の時は hbonds、Minimize(NMA) または NMA の時は none に強制的に設定されます。

	設定内容
Low	Modify cutoff=True rlist=1 rvdw=1 rvdw-switch=0.9 rcoulomb=1 rcoulomb-switch=0.9 nstenergy=10 dt=0.002 nhchainlen=10 shake-tol=1e-5 pme-order=4 ewald-rtol=1e-6 fourier-spacing=0.12 vdw-modifier=potential-shift-verlet coulomb-modifier=potential-shift-verlet nsttcouple=10 nstpcouple=10 Enable double precision=False nstcomm=50 lincs-order=4 lincs-iter=1 buffer-tolerance=1e-6 constraints=all-bonds
Medium	Modify cutoff=True rlist=1.2 rvdw=1.2 rvdw-switch=1.1 rcoulomb=1.2 rcoulomb-switch=1.1 nstenergy=20 dt=0.001 nhchainlen=10 shake-tol=1e-6 pme-order=4 ewald-rtol=1e-6 fourier-spacing=0.11 vdw-modifier=potential-shift-verlet coulomb-modifier=potential-shift-verlet nsttcouple=10 nstpcouple=10 Enable double precision=True nstcomm=50 lincs-order=4 lincs-iter=1

6.14.3 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 *Gromacs* **実行** を参照してください。

電荷が割り当てられていない分子がある場合は、 **自動で電荷を割り当て** が自動で立ち上がります。力場が割り当てられていない場合は、 **力場を割り当て** が自動で立ち上がります。

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。

Continue 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。各プリセットは以下のキーワードを変更します。

	Minimize (fast)	NVT (fast)	NPT (fast)	NVE (fast)
dt		0.002	0.002	0.002
nsteps	5000	5000	5000	5000
integrator	steep	md	md	md
gen-vel		yes	no	no
tcoupl		berendsen	berendsen	
ref-t		300	300	
pcoupl		no	parrinello-rahman	
ref-p			1.0	
pbc	yes	yes	yes	yes
comm-mode	linear	linear	linear	linear
nstcomm		50	50	50
nh-chain-length		10	10	
nsttcouple		-1	-1	
nstpcouple			-1	
constraints	hbonds	all-bonds	all-bonds	all-bonds
lincs-order		4	4	4
lincs-iter		1	1	1
shake-tol		1e-5	1e-5	1e-5
nstxout	100	100	100	100
nstvout	100	100	100	100
nstenergy	10	10	10	10
buffer-tolerance	5e-3	5e-3	5e-3	5e-3
rvdw	1.0	1.0	1.0	1.0
rvdw-switch	0.9	0.9	0.9	0.9
coulombtype	pme	pme	pme	pme
rcoulomb	1.0	1.0	1.0	1.0
rcoulomb-switch	0.9	0.9	0.9	0.9
fourier-spacing	0.12	0.12	0.12	0.12

次のページに続く

表 3 – 前のページからの続き

	Minimize (fast)	NVT (fast)	NPT (fast)	NVE (fast)
pme-order	4	4	4	4
ewald-rtol	1e-5	1e-5	1e-5	1e-5
Enable double precision	False	False	False	False
-DFLEXIBLE	False	False	False	False
Extend simulation from full-precision trajectory	False	False	False	False

	Minimize (medium)	NVT (medium)	NPT (medium)	NVE (medium)
dt		0.001	0.001	0.001
nsteps	10000	10000	10000	10000
integrator	steep	md	md	md
gen-vel		yes	no	no
tcoupl		berendsen	berendsen	
ref-t		300	300	
pcoupl		no	parrinello-rahman	
ref-p			1.0	
pbc	yes	yes	yes	yes
comm-mode	linear	linear	linear	linear
nstcomm		50	50	50
nh-chain-length		10	10	
nsttcouple		-1	-1	
nstpcouple			-1	
constraints	hbonds	hbonds	hbonds	hbonds
lincs-order		4	4	4
lincs-iter		1	1	1
shake-tol		1e-5	1e-5	1e-5
nstxout	200	200	200	200
nstvout	200	200	200	200
nstenergy	20	20	20	20
buffer-tolerance	1e-6	1e-6	1e-6	1e-6

次のページに続く

表 4 – 前のページからの続き

	Minimize (medium)	NVT (medium)	NPT (medium)	NVE (medium)
rvdw	1.2	1.2	1.2	1.2
rvdw-switch	1.1	1.1	1.1	1.1
coulombtype	pme	pme	pme	pme
rcoulomb	1.2	1.2	1.2	1.2
rcoulomb-switch	1.1	1.1	1.1	1.1
fourier-spacing	0.11	0.11	0.11	0.11
pme-order	4	4	4	4
ewald-rtol	1e-6	1e-6	1e-6	1e-6
Enable double precision	True	True	True	True
-DFLEXIBLE	False	False	False	False
Extend simulation from full-precision trajectory	False	False	False	False

	Minimize	NVT	NPT	NVE
dt		0.0005	0.0005	0.0005
nsteps	20000	20000	20000	20000
integrator	steep	md	md	md
gen-vel		yes	no	no
tcoupl		nose-hoover	nose-hoover	
ref-t		300	300	
pcoupl		no	parrinello-rahman	
ref-p			1.0	
pbc	yes	yes	yes	yes
comm-mode	linear	linear	linear	linear
nstcomm		1	1	1
nh-chain-length		1	1	
nsttcouple		1	1	
nstpcouple			1	
constraints	hbonds	hbonds	hbonds	hbonds
lincs-order		8	8	8
lincs-iter		2	2	2

次のページに続く

表 5 – 前のページからの続き

	Minimize	NVT	NPT	NVE
shake-tol		1e-9	1e-9	1e-9
nstxout	400	400	400	400
nstvout	400	400	400	400
nstenergy	40	40	40	40
buffer-tolerance	1e-9	1e-9	1e-9	1e-9
rvdw	1.5	1.5	1.5	1.5
rvdw-switch	1.4	1.4	1.4	1.4
coulombtype	pme	pme	pme	pme
rcoulomb	1.5	1.5	1.5	1.5
rcoulomb-switch	1.4	1.4	1.4	1.4
fourier-spacing	0.10	0.10	0.10	0.10
pme-order	6	6	6	6
ewald-rtol	1e-9	1e-9	1e-9	1e-9
Enable double precision	True	True	True	True
-DFLEXIBLE	False	False	False	False
Extend simulation from full-precision trajectory	False	False	False	False

	Minimize (vapor,fast)	NVT (vapor,fast)	NPT (vapor,fast)	NVE (vapor,fast)
dt		0.002	0.002	0.002
nsteps	5000	5000	5000	5000
integrator	steep	md	md	md
gen-vel		yes	no	no
tcoupl		berendsen	berendsen	
ref-t		300	300	
pcoupl		no	parrinello-rahman	
ref-p			1.0	
pbc	no	no	no	no
comm-mode	angular	angular	angular	angular
nstcomm		50	50	50
nh-chain-length		10	10	

次のページに続く

表 6 – 前のページからの続き

	Minimize (vapor,fast)	NVT (vapor,fast)	NPT (vapor,fast)	NVE (vapor,fast)
nsttcouple		-1	-1	
nstpcouple			-1	
constraints	hbonds	all-bonds	all-bonds	all-bonds
lincs-order		4	4	4
lincs-iter		1	1	1
shake-tol		1e-5	1e-5	1e-5
nstxout	100	100	100	100
nstvout	100	100	100	100
nstenergy	10	10	10	10
buffer-tolerance	5e-3	5e-3	5e-3	5e-3
rvdw	1.0	1.0	1.0	1.0
rvdw-switch	0.9	0.9	0.9	0.9
coulombtype	cut-off	cut-off	cut-off	cut-off
rcoulomb	1.0	1.0	1.0	1.0
rcoulomb-switch	0.9	0.9	0.9	0.9
fourier-spacing				
pme-order				
ewald-rtol				
Enable double precision	False	False	False	False
-DFLEXIBLE	False	False	False	False
Extend simulation from full-precision trajectory	False	False	False	False

	Minimize (vapor)	NVT (vapor)	NPT (vapor)	NVE (vapor)
dt		0.0005	0.0005	0.0005
nsteps	20000	20000	20000	20000
integrator	steep	md	md	md
gen-vel		yes	no	no
tcoupl		nose-hoover	nose-hoover	
ref-t		300	300	

次のページに続く

表 7 – 前のページからの続き

	Minimize (vapor)	NVT (vapor)	NPT (vapor)	NVE (vapor)
pcoupl		no	parrinello-rahman	
ref-p			1.0	
pbc	no	no	no	no
comm-mode	angular	angular	angular	angular
nstcomm		1	1	1
nh-chain-length		1	1	
nsttcouple		1	1	
nstpcouple			1	
constraints	hbonds	hbonds	hbonds	hbonds
lincs-order		8	8	8
lincs-iter		2	2	2
shake-tol		1e-9	1e-9	1e-9
nstxout	400	400	400	400
nstvout	400	400	400	400
nstenergy	40	40	40	40
buffer-tolerance	1e-9	1e-9	1e-9	1e-9
rvdw	1.5	1.5	1.5	1.5
rvdw-switch	1.4	1.4	1.4	1.4
coulombtype	cut-off	cut-off	cut-off	cut-off
rcoulomb	1.5	1.5	1.5	1.5
rcoulomb-switch	1.4	1.4	1.4	1.4
fourier-spacing				
pme-order				
ewald-rtol				
Enable double precision	True	True	True	True
-DFLEXIBLE	False	False	False	False
Extend simulation from full-precision trajectory	False	False	False	False

	Minimize (NMA)	NMA
dt		
nsteps	20000	20000
integrator	l-bfgs	nm
gen-vel		
tcoupl		
ref-t		
pcoupl		
ref-p		
pbc	yes	yes
comm-mode		
nstcomm		
nh-chain-length		
nsttcouple		
nstpcouple		
constraints	none	none
lincs-order		
lincs-iter		
shake-tol		
nstxout	400	400
nstvout	400	400
nstenergy	40	40
buffer-tolerance	1e-9	1e-9
rvdw	1.5	1.5
rvdw-switch	1.4	1.4
coulombtype	pme	pme
rcoulomb	1.5	1.5
rcoulomb-switch	1.4	1.4
fourier-spacing	0.10	0.10
pme-order	6	6
ewald-rtol	1e-9	1e-9
Enable double precision	True	True
emtol	0.01	
-DFLEXIBLE	True	True
Extend simulation from full-precision trajectory	False	True

# 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していします。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）。tc-grps=System の時に freezegrps が設定されていたら tc-grps=freeze_xyz no_freeze とし、no_freeze のみ温度制御します。

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。

Advanced

Boundary Condition

pbc
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

constraints
拘束条件を選択します。

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）

Extend simulation from full-precision trajectory
Continue Simulation にチェックを入れ継続ジョブを流す際に、この項目にチェックが入っていた場合、前のジョブの trr ファイルからジョブを継続します。この項目にチェックが入っていなかった場合、前のジョブの最終状態の gro ファイルからジョブを継続します。例えば、エネルギー極小化計算の後に基準振動解析を実行する場合には、チェックを入れる必要があります。

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。デフォルトで設定できるグループ以外を指定したい場合は Additional Group でグループを追加します。

energygrps
特定原子グループ間のポテンシャルエネルギーの時間変化を取得したい場合はここで、対象となる原子グループ名を指定します。デフォルトで設定できるグループ以外を指定したい場合は Additional Group でグループを追加します。

Additional Group
MD 計算中に利用できる原子グループを追加します。原子グループは、あらかじめメインウィンドウにおいて **グループを登録** で登録しておく必要があります。compressed-x-grps や energygrps で指定したいグループを追加します。ここで指定したグループは、grompp コマンドで tpr ファイルを作成するタイミングで読み込まれる ndx ファイルに追加されます。

Interaction

Modify cutoff radii not to exceed L/2
チェックを入れた場合は、rlist, rvdw, rvdw-switch, rcoulomb, rcoulomb-switch が格子定数の半分を超えないように自動調整します。

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。

BAR

free-energy
溶媒和自由エネルギー計算を有効にします。

couple-moltype
自由エネルギー計算において相互作用の調整パラメータλを変化させる分子種を指定します。Select をクリックすると top ファイルに記載された分子種のリストの中から選択します。

init-lambda-state
相互作用の調整パラメータλの番号（zero-based）を指定します。

calc-lambda-neighbors
自由エネルギー計算における Δ H を計算するための相互作用の調整パラメータλの数を指定します。

sc-power
Beutler らのソフトコア関数における p パラメータを指定します。

sc-sigma
Beutler らのソフトコア関数における σ パラメータを指定します。

sc-alpha
Beutler らのソフトコア関数における α パラメータを指定します。

couple-intramol
分子内の非結合相互作用が相互作用の調整パラメータλとともに変化する（yes）か変化しない（no）かを指定します。

couple-lambda0
相互作用の調整パラメータλが 0 の時の非結合相互作用の状態を指定します。

couple-lambda1
相互作用の調整パラメータλが 1 の時の非結合相互作用の状態を指定します。

nstdhdl
自由エネルギー計算における dH/d λを出力する頻度をステップ数で指定します。

vdw-lambdas
ファンデルワールスポテンシャルに対する相互作用の調整パラメータλのリストを指定します。

coul-lambdas
クーロンポテンシャルに対する相互作用の調整パラメータλのリストを指定します。

Non-equilibrium

Enable annealing to final temperature
ref-t を最初のステップ数での目標温度、Final temperature を最後のステップ数での目標温度

として、温度制御における目標温度を変化させます。annealing, annealing-npoints, annealing-time, annealing-temp キーワードを自動で設定します。

Restraint

Set freezegrps to constrained atoms
メインウィンドウの構造の最適化フラグに基づいて freezegrps を設定し座標を拘束します。

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。

Others

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。

Options

Restore Working Folder
継続ジョブが異常終了時など、**作業フォルダ** を実行前の状態に戻す際にクリックします。

Dump .mdp File
現在開かれているウィンドウで設定した内容で Gromacs の計算条件（mdp）ファイルを作成し保存します。

Dump All Files for Remote
Gromacs を実行せず、Gromacs の計算に必要なファイルを保存だけする機能です。本機能を利用する前に **ツール** → **リモートジョブ投入** ウィンドウを開いてください。

Rerun from xtc
すでに終了した計算から出力されたトラジェクトリ (xtc) ファイルの構造に対し、現在開かれているウィンドウで設定して計算条件を用いてエネルギーのみを計算し、エネルギー（edr）ファイルを取得します。

Open top file
力場を割り当て機能で生成された top ファイルをテキストエディタで開きます。

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 Continue 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。

Overwrites any output file without making a backup in working folder
チェックを入れると、作業フォルダの中に新しいファイルを生成する際に、同名の古いファイルがある場合はバックアップを作成します。ディスク容量確保のため、 *Make a Backup of Working Folder* にチェックが入っている場合はこの項目のチェックを外すことを推奨します。

Read initial temperature and pressure coupling variables from .edr file
継続ジョブ時に温度・圧力制御変数を継続元ジョブの edr ファイルから読み込みます。

Force use Gromacs 5.0.7 on local computer
Gromacs5.0.7 と Gromacs2024.4 がインストールされている CygwinWM 2025/7/1 バージョン以降を利用しているときに、デフォルトでは Gromacs2024.4 が使われるところ、強制的に Gromacs5.0.7 を利用します。特に、自由境界のエネルギー極小化計算を実行したい場合、Gromacs2024.4 には実装されていないため、Gromacs5.0.7 を使う必要があります。ローカルジョブ限定でこの設定は有効です。

Enable detailed parallelization setting
-nt によるトータルスレッド数の指定の代わりに、Thread-MPI(-ntmpi) と OpenMP(-ntomp) の並列数を個々に指定します。

# of Thread-MPI
Thread-MPI の並列数を指定します。

# of OpenMP
OpenMP の並列数を指定します。

Reset
設定をリセットします。

Import
設定ファイルを読み込みます。

Export
設定ファイルを出力します。

6.14.4 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） *Continue Simulation* にチェックがなく、 力場を割り当て において 自動でパラメータを割り当て を選択した場合**
  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。
- ***Continue Simulation* にチェックがなく、 力場を割り当て において トポロジファイルに書かれたパラメータを使用 を選択した場合**
  メインウィンドウで開かれている座標ファイル (拡張子：gro) と、 力場を割り当て で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。
- ***Continue 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座標ファイル (拡張子：gro) に紐づけられた作業フォルダ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。
conf.sh ファイル water_conf.sh	シェルスクリプトのうち、計算内容に依存する設定を抜き出したものです。
bat ファイル water.bat	water.sh を実行するためのバッチファイルです。
作業フォルダ water_gmx_tmp\	作業フォルダです。

作業フォルダ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.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.mdp	計算条件を指定するファイルです。
gmx_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_mdrun.ndx	結果処理のためのインデックスファイルです。
gmx_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_mdrun.gro	最終構造の gro ファイルです。
gmx_mdrun.trr	トラジェクトリファイルです。
gmx_mdrun.xtc	圧縮されたトラジェクトリファイルです。
gmx_mdrun.log	mdrun のログファイルです。

ヒント：作業フォルダ

- 作業フォルダとは、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、作業フォルダの名前は `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フォルダ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フォルダ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、作業フォルダが `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。**

ジョブは *Winmostar Job Manager* を通じて実行されます。

6.14.5 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。

6.14.6 標準出力を表示

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。

6.14.7 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。

計算実行中の trr ファイルを開くと、シミュレーションセル内に折りたたまれた座標しか読み込まれません。計算実行後は **`gmx trjconv -pbc nojump`** コマンドにより trr ファイルが変換されるため折りたたまれていない座標が読み込まれます。

アニメーション表示の操作方法は **アニメーション操作エリア** を参照してください。

6.14.8 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。詳細な挙動は gmx energy のマニュアルをご確認ください。

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。

6.14.9 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。

6.14.10 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。

6.14.11 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。

6.14.12 結果解析

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。詳細な挙動は gmx rdf のマニュアルをご確認ください。動径分布関数は *Reference Group* と *Target Group* の間でを計算されます。

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。CygwinWM 内の Gromacs5.0.7 を利用します。

Center of mass
計算対象を分子の重心位置にします。CygwinWM 内の Gromacs5.0.7 を利用します。

Output

RD
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。

Edit Group
Target Group および Reference Group の内容を調整します。

Create Group (by Element)
Create Group ウィンドウでは、 *Extracted Atom Names* にチェックを入れて *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。

Create Group (by Selecting Atoms in 3D)
Create Group ウィンドウでは、まず *Target* で対象となる分子種を選択し、3D 表示されている分子の中でグループに登録したい原子を Ctrl+クリックまたは Ctrl+ドラッグにより青色で選択した状態にします。そして *Add* をクリックします。グループに登録したい原子を全て Add し *OK* 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。

Select ndx File
ndx ファイルから Group を読み込みます。任意の原子グループに対して結果解析を実施したい場合は、あらかじめメインウィンドウで解析対象をグループ選択し、**登録グループを選択** でグループを登録し、 **登録グループを *ndx* ファイルに書き出し** で ndx ファイルを作成してから本機能でその ndx ファイルを選択してください。

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。

Last Frame
トラジェクトリを読み込む際の終端時間を ps 単位で指定します。 *Maximum* にチェックが入った場合は、最終フレームが指定されます。

Edit Commands in Advance
解析を実行する前に gmx コマンドの引数を編集する。

Show Log
解析実行時に出力された gmx コマンドのログファイルを表示する。

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。

自己拡散係数/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 (MSD) 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。詳細な挙動は gmx msd のマニュアルをご確認ください。CygwinWM 内の Gromacs5.0.7 を利用します。(設定がロバストなため)

Type
no の場合は平均二乗変位を通常通り計算します。x, y, z の場合はそれぞれの軸上で平均二乗変位を計算します。

Time between restarting points
MSD を計算する際の参照点を確保する間隔を指定します。

Specify fitting range for diffusion constant
チェックを入れたら MSD にフィッティングする範囲を明示的に指定します。フィッティング範囲をチェックボックスの右に記入します。フィッティングは自己拡散係数の計算に使われます。

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。

Edit Group
Target Group および Reference Group の内容を調整します。

Create Group (by Element)
Create Group ウィンドウでは、 *Extracted Atom Names* にチェックを入れて *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。

Create Group (by Selecting Atoms in 3D)
Create Group ウィンドウでは、まず *Target* で対象となる分子種を選択し、3D 表示されている分子の中でグループに登録したい原子を Ctrl+クリックまたは Ctrl+ドラッグにより青色で選択した状態にします。そして *Add* をクリックします。グループに登録したい原子を全て Add し *OK* 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。

Select ndx File
ndx ファイルから Group を読み込みます。任意の原子グループに対して結果解析を実施したい場合は、あらかじめメインウィンドウで解析対象をグループ選択し、**登録グループを選択** でグループを登録し、 **登録グループを *ndx* ファイルに書き出し** で ndx ファイルを作成してから本機能でその ndx ファイルを選択してください。

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。

Last Frame
トラジェクトリを読み込む際の終端時間を ps 単位で指定します。 *Maximum* にチェックが入った場合は、最終フレームが指定されます。

Edit Commands in Advance
解析を実行する前に gmx コマンドの引数を編集する。

Show Log
解析実行時に出力された gmx コマンドのログファイルを表示する。

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。

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。詳細な挙動は gmx saxs のマニュアルをご確認ください。

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。

Edit Group
Target Group および Reference Group の内容を調整します。

Create Group (by Element)
Create Group ウィンドウでは、 *Extracted Atom Names* にチェックを入れて *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。

Create Group (by Selecting Atoms in 3D)
Create Group ウィンドウでは、まず *Target* で対象となる分子種を選択し、3D 表示されている分子の中でグループに登録したい原子を Ctrl+クリックまたは Ctrl+ドラッグにより青色で選択した状態にします。そして *Add* をクリックします。グループに登録したい原子を全て Add し *OK* 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。

Select ndx File
ndx ファイルから Group を読み込みます。任意の原子グループに対して結果解析を実施したい場合は、あらかじめメインウィンドウで解析対象をグループ選択し、**登録グループを選択** でグループを登録し、 **登録グループを *ndx* ファイルに書き出し** で ndx ファイルを作成してから本機能でその ndx ファイルを選択してください。

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。

Last Frame
トラジェクトリを読み込む際の終端時間を ps 単位で指定します。 *Maximum* にチェックが入った場合は、最終フレームが指定されます。

Edit Commands in Advance
解析を実行する前に gmx コマンドの引数を編集する。

Show Log
解析実行時に出力された gmx コマンドのログファイルを表示する。

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。

全並進運動量

Gromacs が出力した trr, tpr, ndx ファイルを選択し、系全体の並進運動量を表示します。内部的には速度を含む animated gro ファイルにトラジェクトリを変換してから Winmostar 内部で計算しています。

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。

Edit Group
Target Group および Reference Group の内容を調整します。

Create Group (by Element)
Create Group ウィンドウでは、 *Extracted Atom Names* にチェックを入れて *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。

Create Group (by Selecting Atoms in 3D)
Create Group ウィンドウでは、まず *Target* で対象となる分子種を選択し、3D 表示されている分子の中でグループに登録したい原子を Ctrl+クリックまたは Ctrl+ドラッグにより青色で選択した状態にします。そして *Add* をクリックします。グループに登録したい原子を全て Add し *OK* 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。

Select ndx File
ndx ファイルから Group を読み込みます。任意の原子グループに対して結果解析を実施したい場合は、あらかじめメインウィンドウで解析対象をグループ選択し、**登録グループを選択** でグループを登録し、 **登録グループを *ndx* ファイルに書き出し** で ndx ファイルを作成してから本機能でその ndx ファイルを選択してください。

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。

Last Frame
トラジェクトリを読み込む際の終端時間を ps 単位で指定します。 *Maximum* にチェックが入った場合は、最終フレームが指定されます。

Edit Commands in Advance
解析を実行する前に gmx コマンドの引数を編集する。

Show Log
解析実行時に出力された gmx コマンドのログファイルを表示する。

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。

速度分布

Gromacs が出力した trr, tpr, ndx ファイルを選択し、速度分布を表示します。内部的には速度を含む animated gro ファイルにトラジェクトリを変換してから Winmostar 内部でヒストグラムを計算しています。

Norm
速度ベクトルの絶対値について速度分布を計算します。

X/Y/Z
速度ベクトルの x, y, z 成分について速度分布を計算します。

# of bins
速度分布関数の分割数を指定します。

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。

Edit Group
Target Group および Reference Group の内容を調整します。

Create Group (by Element)
Create Group ウィンドウでは、 *Extracted Atom Names* にチェックを入れて *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。

Create Group (by Selecting Atoms in 3D)
Create Group ウィンドウでは、まず *Target* で対象となる分子種を選択し、3D 表示されている分子の中でグループに登録したい原子を Ctrl+クリックまたは Ctrl+ドラッグにより青色で選択した状態にします。そして *Add* をクリックします。グループに登録したい原子を全て Add し *OK* 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。

Select ndx File
ndx ファイルから Group を読み込みます。任意の原子グループに対して結果解析を実施したい場合は、あらかじめメインウィンドウで解析対象をグループ選択し、**登録グループを選択** でグループを登録し、 **登録グループを *ndx* ファイルに書き出し** で ndx ファイルを作成してから本機能でその ndx ファイルを選択してください。

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。

Last Frame
トラジェクトリを読み込む際の終端時間を ps 単位で指定します。 *Maximum* にチェックが入った場合は、最終フレームが指定されます。

Edit Commands in Advance
解析を実行する前に gmx コマンドの引数を編集する。

Show Log
解析実行時に出力された gmx コマンドのログファイルを表示する。

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。

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。詳細な挙動は gmx velacc のマニュアルをご確認ください。

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。

Edit Group
Target Group および Reference Group の内容を調整します。

Create Group (by Element)
Create Group ウィンドウでは、 *Extracted Atom Names* にチェックを入れて *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。

Create Group (by Selecting Atoms in 3D)
Create Group ウィンドウでは、まず *Target* で対象となる分子種を選択し、3D 表示されている分子の中でグループに登録したい原子を Ctrl+クリックまたは Ctrl+ドラッグにより青色で選択した状態にします。そして *Add* をクリックします。グループに登録したい原子を全て Add し *OK* 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。

Select ndx File
ndx ファイルから Group を読み込みます。任意の原子グループに対して結果解析を実施したい場合は、あらかじめメインウィンドウで解析対象をグループ選択し、**登録グループを選択** でグループを登録し、 **登録グループを *ndx* ファイルに書き出し** で ndx ファイルを作成してから本機能でその ndx ファイルを選択してください。

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。

Last Frame
トラジェクトリを読み込む際の終端時間を ps 単位で指定します。 *Maximum* にチェックが入った場合は、最終フレームが指定されます。

Edit Commands in Advance
解析を実行する前に gmx コマンドの引数を編集する。

Show Log
解析実行時に出力された gmx コマンドのログファイルを表示する。

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。

比誘電率/双極子モーメント

Gromacs が出力した trr, tpr, ndx ファイルを選択し、比誘電率または双極子モーメントの分布・ヒストグラムを表示します。内部的には **`gmx dipoles`** コマンドが実行されます。詳細な挙動は gmx dipoles のマニュアルをご確認ください。

Dielectric constant
比誘電率をプロットします。グラフ中の最終時刻における epsilon の値が、その計算から得られた比誘電率となります。グラフの下にはその値が出力されます。

Total dipole moment
Target Group に所属する分子の双極子モーメントの時間変化をプロットします。

Histogram of total dipole moment
Target Group に所属する分子の双極子モーメントの分布をプロットします。

Autocorrelation function of dipole moment
双極子モーメントの自己相関関数をプロットします。双極子モーメントの定義は Definition で選択します。

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。

Edit Group
Target Group および Reference Group の内容を調整します。

Create Group (by Element)
Create Group ウィンドウでは、 *Extracted Atom Names* にチェックを入れて *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。

Create Group (by Selecting Atoms in 3D)
Create Group ウィンドウでは、まず *Target* で対象となる分子種を選択し、3D 表示されている分子の中でグループに登録したい原子を Ctrl+クリックまたは Ctrl+ドラッグにより青色で選択した状態にします。そして *Add* をクリックします。グループに登録したい原子を全て Add し *OK* 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。

Select ndx File
ndx ファイルから Group を読み込みます。任意の原子グループに対して結果解析を実施したい場合は、あらかじめメインウィンドウで解析対象をグループ選択し、**登録グループを選択** でグループを登録し、 **登録グループを *ndx* ファイルに書き出し** で ndx ファイルを作成してから本機能でその ndx ファイルを選択してください。

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。

Last Frame
トラジェクトリを読み込む際の終端時間を ps 単位で指定します。 *Maximum* にチェックが入った場合は、最終フレームが指定されます。

Edit Commands in Advance
解析を実行する前に gmx コマンドの引数を編集する。

Show Log
解析実行時に出力された gmx コマンドのログファイルを表示する。

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。

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。詳細な挙動は gmx tcaf のマニュアルをご確認ください。

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。

Edit Group
Target Group および Reference Group の内容を調整します。

Create Group (by Element)
Create Group ウィンドウでは、 *Extracted Atom Names* にチェックを入れて *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。

Create Group (by Selecting Atoms in 3D)
Create Group ウィンドウでは、まず *Target* で対象となる分子種を選択し、3D 表示されている分子の中でグループに登録したい原子を Ctrl+クリックまたは Ctrl+ドラッグにより青色で選択した状態にします。そして *Add* をクリックします。グループに登録したい原子を全て Add し *OK* 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。

Select ndx File
ndx ファイルから Group を読み込みます。任意の原子グループに対して結果解析を実施したい場合は、あらかじめメインウィンドウで解析対象をグループ選択し、**登録グループを選択** でグループを登録し、**登録グループを *ndx* ファイルに書き出し** で ndx ファイルを作成してから本機能でその ndx ファイルを選択してください。

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。

Last Frame
トラジェクトリを読み込む際の終端時間を ps 単位で指定します。 *Maximum* にチェックが入った場合は、最終フレームが指定されます。

Edit Commands in Advance
解析を実行する前に gmx コマンドの引数を編集する。

Show Log
解析実行時に出力された gmx コマンドのログファイルを表示する。

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。

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。詳細な挙動は gmx density のマニュアルをご確認ください。

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。

Axis
密度分布を算出する方向を指定します。

# of slices
密度分布のグラフの点数を指定します。

Definition
密度の定義を指定します。

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。

Edit Group
Target Group および Reference Group の内容を調整します。

Create Group (by Element)
Create Group ウィンドウでは、 *Extracted Atom Names* にチェックを入れて *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。

Create Group (by Selecting Atoms in 3D)
Create Group ウィンドウでは、まず *Target* で対象となる分子種を選択し、3D 表示されている分子の中でグループに登録したい原子を Ctrl+クリックまたは Ctrl+ドラッグにより青色で選択した状態にします。そして *Add* をクリックします。グループに登録したい原子を全て Add し *OK* 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。

Select ndx File
ndx ファイルから Group を読み込みます。任意の原子グループに対して結果解析を実施したい場合は、あらかじめメインウィンドウで解析対象をグループ選択し、**登録グループを選択** でグループを登録し、 **登録グループを *ndx* ファイルに書き出し** で ndx ファイルを作成してから本機能でその ndx ファイルを選択してください。

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。

Last Frame
トラジェクトリを読み込む際の終端時間を ps 単位で指定します。 *Maximum* にチェックが入った場合は、最終フレームが指定されます。

Edit Commands in Advance
解析を実行する前に gmx コマンドの引数を編集する。

Show Log
解析実行時に出力された gmx コマンドのログファイルを表示する。

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。

自由体積

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 freevolume** コマンドが実行されます。詳細な挙動は gmx freevolume のマニュアルをご確認ください。

Radius of probe
自由体積算出時に系にランダムに挿入される仮想プローブ粒子の半径を指定します。

# of probe insertions
仮想プローブ粒子の挿入回数を指定します。

Random seed
仮想プローブ粒子を挿入する位置を決める乱数の種を指定します。

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。

Edit Group
Target Group および Reference Group の内容を調整します。

Create Group (by Element)
Create Group ウィンドウでは、 *Extracted Atom Names* にチェックを入れて *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。

Create Group (by Selecting Atoms in 3D)
Create Group ウィンドウでは、まず *Target* で対象となる分子種を選択し、3D 表示されている分子の中でグループに登録したい原子を Ctrl+クリックまたは Ctrl+ドラッグにより青色で選択した状態にします。そして *Add* をクリックします。グループに登録したい原子を全て Add し *OK* 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。

Select ndx File
ndx ファイルから Group を読み込みます。任意の原子グループに対して結果解析を実施したい場合は、あらかじめメインウィンドウで解析対象をグループ選択し、**登録グループを選択** でグループを登録し、 **登録グループを *ndx* ファイルに書き出し** で ndx ファイルを作成してから本機能でその ndx ファイルを選択してください。

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。

Last Frame
トラジェクトリを読み込む際の終端時間を ps 単位で指定します。 *Maximum* にチェックが入った場合は、最終フレームが指定されます。

Edit Commands in Advance
解析を実行する前に gmx コマンドの引数を編集する。

Show Log
解析実行時に出力された gmx コマンドのログファイルを表示する。

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。

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。

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 aij 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。

距離/角度/二面角分布

Gromacs が出力した trr, tpr, ndx ファイルを選択し、選択グループ間の距離、角度、または二面角の分布を表示します。内部的には **`gmx distance`** コマンド（距離）または **`gmx angle`** コマンド（角度、二面角）が実行されます。詳細な挙動は gmx distance 、 gmx angle のマニュアルをご確認ください。

Type
プロットする値の種類（bond, angle, dihedral, improper または ryckaert-bellmemans）を選択します。

Calculate for marked atoms
メインウィンドウでマーカーが付いた原子間で距離、角度、または二面角を計算します。

Calculate for target group
Target Group で選択した ndx ファイルを使用して距離、角度、または二面角を計算します。

Calculate for
選択した angletype または dihedraltype に関して角度または二面角を計算します。

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。

Edit Group
Target Group および Reference Group の内容を調整します。

Create Group (by Element)
Create Group ウィンドウでは、 *Extracted Atom Names* にチェックを入れて *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。

Create Group (by Selecting Atoms in 3D)

Create Group ウィンドウでは、まず *Target* で対象となる分子種を選択し、3D 表示されている分子の中でグループに登録したい原子を Ctrl+クリックまたは Ctrl+ドラッグにより青色で選択した状態にします。そして *Add* をクリックします。グループに登録したい原子を全て Add し *OK* 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。

Select ndx File

ndx ファイルから Group を読み込みます。任意の原子グループに対して結果解析を実施したい場合は、あらかじめメインウィンドウで解析対象をグループ選択し、**登録グループを選択** でグループを登録し、**登録グループを *ndx* ファイルに書き出し** で ndx ファイルを作成してから本機能でその ndx ファイルを選択してください。

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。

Last Frame

トラジェクトリを読み込む際の終端時間を ps 単位で指定します。 *Maximum* にチェックが入った場合は、最終フレームが指定されます。

Edit Commands in Advance

解析を実行する前に gmx コマンドの引数を編集する。

Show Log

解析実行時に出力された gmx コマンドのログファイルを表示する。

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。

基準振動解析

Gromacs が出力した mtx, tpr ファイルを選択し、基準振動解析計算から得られた基準振動を解析します。内部的には **`gmx nmeig`** コマンドが実行されます。詳細な挙動は gmx nmeig のマニュアルをご確認ください。

Amplitude

Animation で基準振動モードを可視化する際に人為的に与える振動の強度を指定します。大きくするほど振動の振幅が大きくなります。

Animation

リストで選択した基準振動モードを Winmostar Viewer で可視化します。内部的には **`gmx nmtraj`** コマンドが実行されます。詳細な挙動は gmx nmtraj のマニュアルをご確認ください。

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。

Edit Group

Target Group および Reference Group の内容を調整します。

Create Group (by Element)

Create Group ウィンドウでは、 *Extracted Atom Names* にチェックを入れて *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。

Create Group (by Selecting Atoms in 3D)
Create Group ウィンドウでは、まず *Target* で対象となる分子種を選択し、3D 表示されている分子の中でグループに登録したい原子を Ctrl+クリックまたは Ctrl+ドラッグにより青色で選択した状態にします。そして *Add* をクリックします。グループに登録したい原子を全て Add し *OK* 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。

Select ndx File
ndx ファイルから Group を読み込みます。任意の原子グループに対して結果解析を実施したい場合は、あらかじめメインウィンドウで解析対象をグループ選択し、**登録グループを選択** でグループを登録し、 **登録グループを *ndx* ファイルに書き出し** で ndx ファイルを作成してから本機能でその ndx ファイルを選択してください。

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。

Last Frame
トラジェクトリを読み込む際の終端時間を ps 単位で指定します。 *Maximum* にチェックが入った場合は、最終フレームが指定されます。

Edit Commands in Advance
解析を実行する前に gmx コマンドの引数を編集する。

Show Log
解析実行時に出力された gmx コマンドのログファイルを表示する。

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。

水素結合解析

Gromacs が出力した trr, tpr, ndx ファイルを選択し、選択グループ間の水素結合を解析します。内部的には **`gmx hbond`** コマンドが実行されます。詳細な挙動は gmx hbond-legacy のマニュアルをご確認ください。

Type
プロットする値の種類を選択します。Autocorrelation function の場合は、CygwinWM 内の Gromacs5.0.7 を利用します。

Cutoff angle
水素結合を判定する際の水素-ドナー-アクセプター間角度のカットオフ値を指定します。

Cutoff distance
水素結合を判定する際のドナー-アクセプター間距離のカットオフ値を指定します。

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。

Edit Group
Target Group および Reference Group の内容を調整します。

Create Group (by Element)
Create Group ウィンドウでは、 *Extracted Atom Names* にチェックを入れて *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。

Create Group (by Selecting Atoms in 3D)
Create Group ウィンドウでは、まず *Target* で対象となる分子種を選択し、3D 表示されている分子の中でグループに登録したい原子を Ctrl+クリックまたは Ctrl+ドラッグにより青色で選択した状態にします。そして *Add* をクリックします。グループに登録したい原子を全て Add し *OK* 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。

Select ndx File
ndx ファイルから Group を読み込みます。任意の原子グループに対して結果解析を実施したい場合は、あらかじめメインウィンドウで解析対象をグループ選択し、**登録グループを選択** でグループを登録し、 **登録グループを *ndx* ファイルに書き出し** で ndx ファイルを作成してから本機能でその ndx ファイルを選択してください。

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。

Last Frame
トラジェクトリを読み込む際の終端時間を ps 単位で指定します。 *Maximum* にチェックが入った場合は、最終フレームが指定されます。

Edit Commands in Advance
解析を実行する前に gmx コマンドの引数を編集する。

Show Log
解析実行時に出力された gmx コマンドのログファイルを表示する。

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。

原子/グループ間距離変化

Gromacs が出力した trr, tpr, ndx ファイルを選択し、特定原子間または特定原子グループ間の距離の変化を解析します。内部的には **`gmx distance`** コマンドが実行されます。詳細な挙動は gmx distance コマンド のマニュアルをご確認ください。

Definition of distance
距離の定義を選択します。「COMs of Reference and Target Groups」の場合は、Reference Group で選択したグループの重心と Target Group で選択したグループの重心の間の距離を算出します。「Odd and even atoms in Target Group」の場合は、Target Group に指定されたグループに定義されている、奇数の原子と偶数の原子の間の距離を算出します。

Component
プロットする距離の種類を選択します。

Use periodic boundary condition
距離の算出時に周期境界条件を適用します。

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。

Edit Group
Target Group および Reference Group の内容を調整します。

Create Group (by Element)
Create Group ウィンドウでは、 *Extracted Atom Names* にチェックを入れて *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。

Create Group (by Selecting Atoms in 3D)
Create Group ウィンドウでは、まず *Target* で対象となる分子種を選択し、3D 表示されている分子の中でグループに登録したい原子を Ctrl+クリックまたは Ctrl+ドラッグにより青色で選択した状態にします。そして *Add* をクリックします。グループに登録したい原子を全て Add し *OK* 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。

Select ndx File
ndx ファイルから Group を読み込みます。任意の原子グループに対して結果解析を実施したい場合は、あらかじめメインウィンドウで解析対象をグループ選択し、**登録グループを選択** でグループを登録し、 **登録グループを *ndx* ファイルに書き出し** で ndx ファイルを作成してから本機能でその ndx ファイルを選択してください。

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。

Last Frame
トラジェクトリを読み込む際の終端時間を ps 単位で指定します。 *Maximum* にチェックが入った場合は、最終フレームが指定されます。

Edit Commands in Advance
解析を実行する前に gmx コマンドの引数を編集する。

Show Log
解析実行時に出力された gmx コマンドのログファイルを表示する。

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。

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。詳細な挙動は gmx rms のマニュアルをご確認ください。

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。

Edit Group
Target Group および Reference Group の内容を調整します。

Create Group (by Element)
Create Group ウィンドウでは、 *Extracted Atom Names* にチェックを入れて *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。

Create Group (by Selecting Atoms in 3D)
Create Group ウィンドウでは、まず *Target* で対象となる分子種を選択し、3D 表示されている分子の中でグループに登録したい原子を Ctrl+クリックまたは Ctrl+ドラッグにより青色で選択した状態にします。そして *Add* をクリックします。グループに登録したい原子を全て Add し *OK* 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。

Select ndx File
ndx ファイルから Group を読み込みます。任意の原子グループに対して結果解析を実施したい場合は、あらかじめメインウィンドウで解析対象をグループ選択し、**登録グループを選択** でグループを登録し、 **登録グループを *ndx* ファイルに書き出し** で ndx ファイルを作成してから本機能でその ndx ファイルを選択してください。

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。

Last Frame
トラジェクトリを読み込む際の終端時間を ps 単位で指定します。 *Maximum* にチェックが入った場合は、最終フレームが指定されます。

Edit Commands in Advance
解析を実行する前に gmx コマンドの引数を編集する。

Show Log
解析実行時に出力された gmx コマンドのログファイルを表示する。

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。

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-legacy`** コマンドが実行されます。詳細な挙動は gmx gyrate のマニュアルをご確認ください。

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。

Edit Group
Target Group および Reference Group の内容を調整します。

Create Group (by Element)
Create Group ウィンドウでは、 *Extracted Atom Names* にチェックを入れて *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。

Create Group (by Selecting Atoms in 3D)
Create Group ウィンドウでは、まず *Target* で対象となる分子種を選択し、3D 表示されている分子の中でグループに登録したい原子を Ctrl+クリックまたは Ctrl+ドラッグにより青色で選択した状態にします。そして *Add* をクリックします。グループに登録したい原子を全て Add し *OK* 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。

Select ndx File
ndx ファイルから Group を読み込みます。任意の原子グループに対して結果解析を実施したい場合は、あらかじめメインウィンドウで解析対象をグループ選択し、**登録グループを選択** でグループを登録し、 **登録グループを *ndx* ファイルに書き出し** で ndx ファイルを作成してから本機能でその ndx ファイルを選択してください。

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。

Last Frame
トラジェクトリを読み込む際の終端時間を ps 単位で指定します。 *Maximum* にチェックが入った場合は、最終フレームが指定されます。

Edit Commands in Advance
解析を実行する前に gmx コマンドの引数を編集する。

Show Log
解析実行時に出力された gmx コマンドのログファイルを表示する。

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。

Ramachandran 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 Ramachandran 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。詳細な挙動は gmx rama のマニュアルをご確認ください。

Residue
ここで選択した残基の Ramachandran 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。

Edit Group
Target Group および Reference Group の内容を調整します。

Create Group (by Element)
Create Group ウィンドウでは、 *Extracted Atom Names* にチェックを入れて *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。

Create Group (by Selecting Atoms in 3D)
Create Group ウィンドウでは、まず *Target* で対象となる分子種を選択し、3D 表示されている分子の中でグループに登録したい原子を Ctrl+クリックまたは Ctrl+ドラッグにより青色で選択した状態にします。そして *Add* をクリックします。グループに登録したい原子を全て Add し *OK* 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。

Select ndx File
ndx ファイルから Group を読み込みます。任意の原子グループに対して結果解析を実施したい場合は、あらかじめメインウィンドウで解析対象をグループ選択し、**登録グループを選択** でグループを登録し、 **登録グループを *ndx* ファイルに書き出し** で ndx ファイルを作成してから本機能でその ndx ファイルを選択してください。

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。

Last Frame
トラジェクトリを読み込む際の終端時間を ps 単位で指定します。 *Maximum* にチェックが入った場合は、最終フレームが指定されます。

Edit Commands in Advance
解析を実行する前に gmx コマンドの引数を編集する。

Show Log
解析実行時に出力された gmx コマンドのログファイルを表示する。

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。

6.14.13 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。詳細な挙動は gmx trjconv のマニュアルをご確認ください。*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 refernce 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。

6.14.14 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。

1. 事前に以下 3 つ系の計算を Gromacs で実行し、それぞれの作業フォルダを残しておきます。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。
   A. Solution system（溶質分子 1 個＋溶媒分子多数）
   B. Solvent system（溶媒分子多数）
   C. Solute system（溶質分子 1 個）
2. *Solution* タブで A. Solution system の作業フォルダ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。
3. 同様に *Solvent* タブで B. Solvent system のファイルを選択します。
4. 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。
5. *Solute Name* において溶質の分子名を選択します。
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。

ヒント: Winmostar ではサポートされていない ERmod の機能を用いて解析を行う場合は、以下の手順で解析することも可能です。

1. まずは、溶液、溶媒のみ、溶質のみの MD を Winmostar で計算します。それらの手順は、ER 法を用いたチュートリアルを参考にしてください。
2. ERmod 公式 HP の Quick Start Guide の「Generate input configuration for running ermod」以降の手順に従って操作をします。Winmostar の [ツール]-[Cygwin] をクリックすると、Cygwin のターミナルが起動し、そこでは Gromacs, ERmod 等のインストールが完了しています。手順中の「(ERmod directory)」は Cygwin 上では /usr/local/ermod となります。 etohsolution.top は溶

液の計算開始時に保存された top ファイルとなります。 `solution_run.xtc` や `solution_run.log` などの xtc, log ファイルは、それぞれ溶液、溶媒のみ、溶質のみの MD の作業フォルダに収められているものをご使用ください。

ERmod の実行中に、残りの処理と予測終了時間が表示されます。この表示は ERmod 自体が出力しているわけではなく、Winmostar が生成する独自のスクリプトで計算しています。処理が 100 %に到達せず処理が終了する場合は、ERmod は正常終了しているが単に表示が追い付いていない場合と、ERmod が異常終了した場合の 2 通り考えられます。正常終了している場合は *ER* **法結果読み込み** で結果を表示することができます。

6.14.15 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。

6.14.16 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フォルダを残しておきます。
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（λ=0）から相互作用している状態（λ=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（λ=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。

6.14.17 BAR 法結果読み込み

ファイルモードでは、*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。

プロジェクトモードでは、free-energy=yes で実行した MD 計算の作業フォルダを選択してください。各 lambda で計算した作業フォルダにチェックを入れてください。

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。詳細な挙動は gmx bar のマニュアルをご確認ください。

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、**`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（λ=0）から相互作用している状態（λ=1）の間で自由エネルギーが変化する様子を示しています。

6.15 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。

6.15.1 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。

Lattice

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）。

Asymmetric unit

Add atom
非対称要素となる原子を追加します。

Delete atom
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。

Element
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** → **元に戻す** 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。

6.15.2 スラブを作成

ツール → 環境設定 メニュー において **新しいスラブ作成機能を使用する** にチェックが入っている場合は以下の通りに動作します。

Miller indices
スラブ表面のミラー指数を入力します。

Force orthorhombic cell
チェックが入っていない場合は、内部処理で一番最初に見つかった指定したミラー指数を満たす基本格子が出現します。チェックが入った場合は、指定したミラー指数を満たす直方体の基本格子が見つかるまで内部処理が実行されその構造が出現します。

Supercell
表面水平方向 (a または b-axis) のスーパーセルの個数を入力します。

Set slab width by length
スラブの厚みをオングストローム単位で指定します。Lower bound と Upper bound にスラブの下端、上端の位置を入力します。

Set slab width by repeat units
スラブの厚みを基本格子単位で指定します。Lower bound と Upper bound にスラブの下端、上端の位置を入力します。

Vacuum
真空層の厚みを入力します。Vacuum を入力した場合は Total width が自動で変更されます。

Total width
c 軸方向のセルの長さを入力します。Total width を入力した場合は Vacuum が自動で変更されます。

Position
表面垂直方向のスラブの位置を指定します。

Terminate dangling bonds width hydrogen
チェックを入れた場合はスラブ表面で切断された結合に対し水素を付加します。水素が想定より多く付加された場合は本機能を使用後 **グループを削除** または **原子を削除** で余分な水素原子を削除してください。

Do not insert vacuum
チェックを入れた場合は真空層を挿入しません。スラブを作成せず、基本格子をミラー指数で取り直したいだけの場合に使います。指定したミラー指数の基本格子が見つかった場合のみ使うことができます。

Invert model
z 方向にモデルを反転させます。

Maximum slab width internally generated
高指数面の場合など指定したミラー指数で基本格子が見つからなかった場合に、内部処理で生成するスラブの最大厚みを指定します。Lower bound または Upper bound で設定する値（絶対値）はこの値の半分よりも小さい必要があります。

Adsorb Atom/Mole ボタン
現在表示されているスラブ構造の表面に対し **原子/分子を吸着** 機能を用いて原子または分子を吸着させます。

OK ボタン
スラブモデルを作成しメインウィンドウに表示します。

ツール → 環境設定 メニュー において **新しいスラブ作成機能を使用する** にチェックが入っていない場合は以下の通りに動作します。

（バルクの）結晶の CIF ファイルを読み込んだ状態で本機能を呼び出すと、スラブを作成することができます。内部的には pymatgen または pymatgen を模擬する内製ルーチンを利用しています。

まず、 *Generate Slab* ボタンをクリックした後、 *OK* ボタンをクリックします。

Miller indices
スラブ表面のミラー指数を入力します。

Minimum slab size
表面垂直方向 (c-axis) のセルサイズを入力します。

Supercell
表面水平方向 (a または b-axis) のスーパーセルの個数を入力します。

Force c-axis to be perpendicular to a and b axes
c 軸が a および b 軸に垂直になるようにします。

Convert hexagonal to orthorhombic
Hexagonal を Orthorhombic に変換します。

Generate Slab ボタン
本ボタンより上の項目に基づき表面構造の候補を作成します。

Surface configurations
表面構造を候補の中から選択します。

Slab, Vacuum, Total width
表面垂直方向のサイズを入力します。 *Vacuum* あるいは *Total width* のどちらかを入力したら、他方が自動で決定されます。

Position
表面垂直方向のスラブの位置を指定します。

OK ボタン
スラブモデルを作成しメインウィンドウに表示します。

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

6.15.3 原子/分子を吸着

スラブモデルの表面に対し原子または分子を吸着させます。あらかじめスラブモデルを **スラブを作成** 機能などで作成してから本機能を呼び出します。

Basic タブ

Adsorbate
吸着子を指定します。Atom の場合はその右の欄で選択した原子を吸着させます。File の場合はあらかじめ保存したファイル内の構造を吸着させます。多原子分子を吸着させる場合は File を使います。

Reference position
吸着子の基準位置を指定します。Center of mass の場合は吸着子の重心が基準位置になります。Specific atom の場合はその右の欄で選択した原子の位置を基準位置とします。Select ボタンをクリックすると基準位置となる原子をグラフィカルに指定できます。

Alignment
吸着子の配向を指定します。Do not change の時は読み込んだファイルの座標をそのまま使います。Principle axis の場合は、吸着子の慣性主軸がスラブ表面に垂直となるように配向を変更します。Ref bond along z の場合は、Reference position で選択した原子に接続する結合がスラブ表面に垂直となるように配向を変更します。

Angle
吸着子の表面水平方向の角度を指定します。

Adsorption site
吸着様式を指定します。Single の場合は、吸着子を 1 つだけ吸着させます。Target では吸着サイトの種類、Site#では Target で選択した吸着サイトの中で実際に吸着させるサイトの番号を指定します。Multiple (Random) の場合は、複数のサイトに確率的に吸着子を吸着させます。Target では吸着サイトの種類、Coverage では Target で選択した吸着サイトのうち何割に吸着子を吸着させるか指定します。

Height
吸着サイトと吸着子の Reference position の間の高さを指定します。

Advanced タブ

Tolerance (length)
吸着サイトを検出する際の許容誤差を指定します。

Tolerance (angle)
正三角形のサイトの検出に使われます。fcc, hcp サイトの検出に使われます。

6.15.4 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。

6.15.5 クラスタを作成

結晶構造からナノクラスターを切り出します。

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
クラスターの半径をオングストローム単位で指定します。

Hydrogen
クラスター表面に水素を修飾します。

OK
処理を実行します。

6.15.6 界面ビルダ

MD → **界面ビルダ メニュー** を参照してください。

6.15.7 格子を変換 (Primitive-Conventional)

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。バックグラウンドで spglib を使用しています。

6.15.8 格子を等価な直方体セルに変換

メインウィンドウで表示されているセルについて、等価な直方体セルに変換に変換します。六方晶を直方体セルに変換する際に便利です。バックグラウンドで atomsk を利用しています。

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

6.15.9 単位格子を変換

回転行列を用いて a, b, c 軸それぞれの単位格子ベクトルを変形します。回転行列の各要素は整数となっているので、変形後のセルも単位格子となります。単位格子ベクトルを取り直したいときに有用です。

6.15.10 対称性を考慮して結晶構造を調整

メインウィンドウで表示されているセルについて、設定した許容誤差で対称性を検出した上で、その対称性に従うよう座標を微修正します。Quantum ESPRESSO などで対称性由来の不具合が出る際にこの機能を利用すると不具合を回避できるようになる可能性があります。バックグラウンドで spglib を利用しています。

6.15.11 Quantum ESPRESSO

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

6.15.12 OpenMX

固体 → *OpenMX* **メニュー** を参照してください。

6.15.13 FDMNES

固体 → *FDMNES* **メニュー** を参照してください。

6.16 固体 → *Quantum ESPRESSO* メニュー

Quantum ESPRESSO に関するメニューです。

6.16.1 Quantum ESPERSSO の設定方法

Quantum ESPRESSO をインストールするには、2023/04/05 バージョン以降の CygwinWM をインストールしてください。CygwinWM の `/opt_win/QuantumESPRESSO*/bin/` に `pw.exe` などが収められています。

Winmostar から Quantum ESPRESSO を利用するための設定は **ツール → 環境設定 メニュー** で行います。Winmostar V11.5.0 以降を新規インストールし CygwinWM 2023/04/05 バージョン以降を利用する場合は設定不要です。

まず **プログラムパス** → *Quantum ESPRESSO* で使用する Quantum ESPRESSO の `pw.exe` を選択します。次に、**計算** → *mpiexec (QE)* で *MPICH* を選択するか、*Select* を選択し使用する MPI の `mpiexec.exe` を選択します。CygwinWM に収められた Quantum ESPRESSO を使う場合は、CygwinWM の下の `/opt_win/MSMPI/Bin/mpiexec.exe` を選択します。次に、 **計算** → *Options for mpiexec (QE)* で **`mpiexec.exe`** の引数を入力します。CygwinWM に収められた Quantum ESPRESSO を使う場合は、**`-np %WM_NUM_PROC%`** と入力します。最後に、 **計算** → **使用する *QE* のバージョン** で選択した `pw.exe` のバージョンを選択します。CygwinWM に収められた Quantum ESPRESSO を使う場合は、*7.1* を選択します。

擬ポテンシャルファイルを追加したい場合は、 **ツール → 環境設定 メニュー** → **計算** → *Solid* → *QE* **擬ポテンシャルフォルダ** → *Open QE pseudo directory* をクリックし、開いたフォルダに擬ポテンシャルファイルを追加します。擬ポテンシャルファイルの拡張子は upf（大文字、小文字の区別なし）である必要があります。擬ポテンシャルフォルダを新規に作成し選択することも可能です。

RISM 計算用の MOL ファイルを追加したい場合は、 **ツール → 環境設定 メニュー** → **計算** → *Solid* → *QE MOL* **ファイル用フォルダ** → *Open* をクリックし、開いたフォルダに MOL ファイルを追加します。擬ポテンシャルファイルの拡張子は mol（大文字、小文字の区別なし）である必要があります。MOL ファイル用フォルダを新規に作成し選択することも可能です。

リモートマシンに 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。

6.16.2 ワークフロー設定

プロジェクトモードにおける Quantum ESPRESSO の計算フローを設定、実行します。

Preset
: 設定のプリセットを呼び出し、保存します。

# of Jobs
: ジョブの数を指定します。

Enable parameter/structure scan
: この機能を使うためにはアドオンの購入が必要です。特定のパラメータだけが異なる複数の計算を流したり（パラメータスキャン）、複数の構造に対し同一のパラメータで計算を流す（構造スキャン）ことが可能となります。

  Config をクリックするとスキャン計算の設定画面が出現します。

  パラメータスキャンの際は *Target Variable* に%WM_SCAN1%を選択し、 *Values* の各行に%WM_SCAN1%に設定したいパラメータを入力します。そして、ワークフロー設定ウィンドウまたはキーワード設定ウィンドウにおいて設定したいパラメータに%WM_SCAN1%と入力します。

Values の各行にスペース区切りで値が記入されている場合は、1 列目の値を%WM_SCAN1_1%、2 列目の値を%WM_SCAN1_2%... といった具合に参照することができます。

並列数をスキャンしたい場合は、# of Threads または# of Procs を選択します。

構造スキャンの際は、分子表示エリアでアニメーションが出現した状態（SDF ファイルを開くなど）で、 *Target Variable* に%WM_STRUCT%を選択します。また、構造スキャン実行時には作業フォルダに label_scan_struct.txt というファイル名で、アニメーション表示エリアのリストの文字列が保存されます。

スキャン計算の終了後は **ファイル** → **プロジェクト** → **スキャン結果表示** を利用して計算結果を集計します。

Import
Export で出力した設定を読み込みます。ボタン右の矢印をクリックすると、過去同じプロジェクトまたは Winmostar 上で使用した設定を呼び出すことができます。

Export
設定をファイルに出力します。

OK
設定した内容で計算を実行またはファイルを生成します。詳しくは **プロジェクトモードの場合** を参照してください。

Details
計算条件を詳細に設定します。 **キーワード設定** が立ち上がります。

Task
計算の種類を指定します。

	設定内容
Energy	calculation=scf ion_dynamics=none cell_dynamics=none tprnfor=False tstress=False nosym=False nstep=50 Use cell_factor=False electron_dynamics=none pot_extrapolation=none wfc_extrapolation=none Unit for atomic position=angstrom
NSCF	calculation=nscf ion_dynamics=none cell_dynamics=none tprnfor=False tstress=False nosym=False nstep=50 Use cell_factor=False electron_dynamics=none pot_extrapolation=none wfc_extrapolation=none Unit for atomic position=angstrom
Optimize(Atom)	calculation=relax ion_dynamics=bfgs cell_dynamics=none tprnfor=True tstress=False nosym=False nstep=50 Use cell_factor=False electron_dynamics=none pot_extrapolation=none wfc_extrapolation=none Unit for atomic position=angstrom
Optimize(Atom&Cell)	calculation=vc-relax ion_dynamics=bfgs cell_dynamics=bfgs tprnfor=True

Charge
系全体の電荷を指定します。

# of bands
バンド数を指定します。

Spin
スピン分極計算の設定をします。Polarized(Manual) では Use Spin Density as が False となり各元素が 1 種類の初期磁化モーメントしか持てないため、磁性体の計算では Polarized の方が柔軟に初期磁化モーメントを設定できます。

	設定内容
Non-polarized	nspin=1
Polarized	nspin=2 Use Spin Density as=True
Polarized(Manual)	nspin=2 Use Spin Density as=False

Cutoff energy
波動関数のカットオフエネルギー（ecutwfc）を設定します。

Manually specify cutoff energy
チェックが入っていない場合は Precision から Cutoff energy を自動指定します。

K points
K 点の計算方法を指定します。

Pressure
圧力を指定します。

Phonon(DFPT)
DFPT(ph.x) を用いたフォノン計算の設定をします。

	設定内容
Disabled	Run phonon=False epsil=False lraman=False asr=no ldisp=False
Gamma	Run phonon=True epsil=True lraman=True asr=crystal ldisp=False
Dispersion	Run phonon=True epsil=False lraman=False asr=crystal ldisp=True

Use Bravais-lattice index
チェックを入れた場合は入力ファイルを ibrav=0 以外で作成します。バンド構造、フォノンバンドの計算時に ibrav から特殊点を設定する必要があるのでチェックを入れてください。

Pseudopotential
擬ポテンシャルファイルを指定します。Type を変更すると Functional と Pseudo file が絞り込まれます。Functional を変更すると Pseudo file が絞り込まれます。所望の選択肢が出現しない場合の操作方法は **キーワード設定** の Pseudopotential を参照してください。

Properties
計算時に合わせてチェックを入れた物性を計算します。

Precision
計算精度を設定します。

	設定内容
Extra-low	conv_thr=1d-5 etot_conv_thr=1d-3 forc_conv_thr=1d-2 press_conv_thr=1.0 degauss=0.02 tr2_ph=1d-10 Spacing=0.44(metal) 0.63(nonmetal) ecutwfc=30(metal) 25(nonmetal)
Low	conv_thr=1e-6 etot_conv_thr=1d-4 forc_conv_thr=1d-3 press_conv_thr=0.5 degauss=0.02 tr2_ph=1e-11 Spacing=0.44(metal) 0.63(nonmetal) ecutwfc=40(metal) 30(nonmetal)
Medium	conv_thr=2d-7 etot_conv_thr=4d-5 forc_conv_thr=5d-4 press_conv_thr=0.25 degauss=0.02 tr2_ph=1e-12 Spacing=0.31(metal) 0.50(nonmetal) ecutwfc=50(metal) 35(nonmetal)
High	conv_thr=1d-7 etot_conv_thr=2d-5 forc_conv_thr=3d-4 press_conv_thr=0.125 degauss=0.02 tr2_ph=1e-14 Spacing=0.25(metal) 0.44(nonmetal) ecutwfc=55(metal) 40(nonmetal)
Extra-high	conv_thr=5d-8 etot_conv_thr=1d-5 forc_conv_thr=1d-4 press_conv_thr=0.05 degauss=0.01 tr2_ph=1e-16

Metal
スメアリングを有効にします。（occupations=smearing）また、Precision（上記）の内容も調整します。

6.16.3 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。

本機能を呼び出すときに、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** *(Primitive-Conventional)* 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。各プリセットは以下のキーワードを変更します。

	SCF	SCF+Ba +DOS	SCF+Ba (Fermi surf)	Relax	Relax (variable cell)	BOMD	CPMD	Phonopy
calculatio	scf	scf	scf	relax	vc-relax	md	cp	scf
Use nbnd	False	True	True	False	False	False	False	False
K_POINT	gamma	automatic 4 4 4 1 1 1	automatic 4 4 4 1 1 1	gamma	automatic 4 4 4 1 1 1	gamma	gamma	gamma
tstress	False	False	False	False	False	True	False	False
Set ibrav and celldm	False	True	True	False	False	False	False	False
occupatio			smear-ing					
ion_dyna				bfgs	bfgs	verlet	none	
cell_dyna					bfgs			
tprnfor	False	False	False	True	True	True	True	True
tstress	False	False	False	False	True	False	False	True
Use cell_facto	False	False	False	False	True	False	False	False
pot_extra						sec-ond_orde		

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

restart_mode
from_scratch の時は、過去のジョブの情報を使わずにジョブを開始します。restart の時は outdir の情報から引き継いでジョブを開始します。Automatically set の時は、プロジェクトモードでは新規ジョブで from_scratch、それ以外で restart となります。ファイルモードでは、Output Directory=Create で from_scracth、それ以外で restart となります。

calculation
計算の種類を選択します。

# of bands
括弧内に選択されたは擬ポテンシャルを使用したときの価電子数が表示されます。価電子数の自動計算に失敗した場合は N/A と表示されます。

Do not specify
nbnd が自動で設定されます。

Specify nbnd
明示的にバンド数を指定します。

Specify nbnd(Relative)
価電子バンド数からの相対値で指定します。

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。

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。 SeeK-path などのウェブサイトで生成した k 点の情報を使いたい場合は、K_POINTS の種類 (crystal など) を選択した後でその下のテキストボックスに k 点の座標と点数を貼り付けてください。入力ファイルに書き出される k 点数（nks）は自動的に補われます。

gamma
Γ 点のみで計算されます。

automatic
Monkhorst-Pack 法を使用します。「(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。

automatic(by spacing)
Monkhorst-Pack 法を使用します。各方向の分割数は Spacing パラメータ（ *Spacing* **パラメータ** ）で設定されます。

automatic(by spacing,slab)
Monkhorst-Pack 法を使用します。各方向の分割数は Spacing パラメータ（ *Spacing* **パラメータ** ）で設定されます。ただし自動的に検出されるスラブ垂直方向の分割数は 1 に設定されます。

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。

Ecut for US/PAW
ウルトラソフト、PAW の擬ポテンシャルファイルを選択した際の ecutrho の指定方法を設定します。

Specify ecutrho/ecutwfc
ecutrho と ecutwfc の比と ecutwfc の値から ecutrho を設定します。

Specify ecutrho
ecutrho の値を直接設定します。

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。

Advanced 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。

diagonalozation
対角化アルゴリズムを指定します。

diago_david_ndim
Davidson アルゴリズムでの対角化時のワークスペースの大きさを指定します。

spline_ps
cubic spline で擬ポテンシャルを内挿します。GIPAW 計算で有用です。

la2F (for pw.x)
pw.x において電子フォノン相互作用計算用に固有値の書かれたファイルを出力します。

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。

nqx1/2/3
Fock 演算子計算時の k 点サンプリング数を指定します。Default の場合は K_POINTS と同じ値を使います。

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いい場合があります。

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。この場合同元素の原子がすべて同じ値を持つため、反強磁性体を計算したい場合は Use Spin Density as starting_magnetization を使用してください。

noncolin
ノンコリニア計算の有無を指定します。チェックを入れた場合は nspin を入力ファイルに出力しません。nspin は出力されませんが、starting_magnetization を設定するには同じタブ上で nspin=2 に設定しておく必要があります。

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。

Use Spin Density as starting_magnetization
メインウィンドウで設定された Spin Density の値をそのまま starting_magnetization として使用します。チェックを入れた場合は上の starting_magnetization が無視されます。反強磁性体のように同元素の原子が異なる starting_magnetization を持つ場合はこの機能を使用してください。

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, nscf または relax を選ぶ必要があります。SCF 計算または Relax 計算が終わった状態から ph.x を実行したいときには、Calculation=nscf で実行すると pw.x がすぐに終了し ph.x の処理にすぐに入ります。ph.x などの入出力ファイルは作業フォルダ内に作成されます。

tr2_ph
フォノン計算の打ち切り誤差を指定します。

alpha_mix(1)
mixing factor を指定します。

epsil=.True.
フォノン計算から得られる誘電率（電子系）を計算します。

lraman=.True.
Raman スペクトルの計算を含めます。

electron_phonon
電子フォノン相互作用計算の方式を指定します。

el_ph_sigma
電子フォノン相互作用計算中の double-delta スメアリングの間隔を指定します。

el_ph_nsigma
電子フォノン相互作用計算中の double-delta スメアリングの数を指定します。

Use fildvscf
電子フォノン相互作用計算で使うファイルを q2r.x 実行時に出力します。

la2F = .true. (for q2r)
電子フォノン相互作用計算でチェックを入れてください。

asr(for dynmat)
フォノン計算後のポスト処理（dynmat.x）において 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。

lperm=.True.(for dynmat)
フォノン計算後のポスト処理（dynmat.x）においてΓ点の誘電率に対する寄与（イオン振動寄与分を含めた全誘電率）を算出します。

ldisp=.true.
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。

nq1,nq2,nq3
フォノン分散の計算時の K 点の数を指定します。

Use spacing
Monkhorst-Pack 法を使用します。各方向の分割数は Spacing パラメータ（ *Spacing* **パラメータ** ）で設定されます。

NMR/EFG タブ

Run GIPAW calculation (gipaw.x) as postprocess
GIPAW 計算を実行します。具体的には、pw.x を実行した後に gipaw.x を実行します。gipaw.x の入出力ファイルは作業フォルダ内に作成されます。GIPAW 計算の結果の詳細を確認するには、gipaw.out または gipaw2.out を直接テキストエディタで開きます。

job
GIPAW 計算で出力する内容を指定します。「nmr & efg」を選んだ時は gipaw.x を 2 回起動し、それぞれ job=nmr と job=efg で計算します。

conv_threshold
対角化の打切り誤差を指定します。

diagonalization
対角化方法を指定します。

q_gipaw
線形応答理論で計算する際に使う、微小な波数の大きさを指定します。

verbosity
ログへの出力レベルを指定します。

use_nmr_macroscopic_shape/nmr_macroscopic_shape
サンプルのマクロな形状を考慮して化学シフトの値を補正するか指定します。

spline_ps
擬ポテンシャルをスプライン補完するか指定します。

q_efg
原子核の四重極モーメントを指定します。

hfi_nuclear_g_factor
原子核の g テンソルを指定します。

Enter q_efg
q_efg の入力補助機能です。デフォルトまたはユーザが用意した q_efg のテーブルから引用することができます。

Open q_efg table
q_efg のテーブルを開きます。

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。

Dipole Corr/Polarization タブ

tefield
ノコギリ型の外部電場を印加します。

dipfield
ダイポール補正を使用します。

edir
tefield と dipfield が適用される方向を設定します。

emaxpos
tefield と dipfield を適用する際の、外部電場が最大値となる場所を分率座標（0 から 1 の範囲）で与えます。

eopreg
tefield と dipfield を適用する際の、外部電場が減衰する領域のサイズを分率座標で与えます。

eamp
tefield と dipfield を適用する際の、外部電場の大きさを与えます。

lberry
Berry 位相計算を実行します。

gdir
Berry 位相計算の方向を指定します。

# of k-points
Berry phase 計算時の各 k 点列における k 点数 (nppstr) の設定方法を指定します。Specify nppstr の場合は nppstr を直接入力します。Specify nppstr(Relative) の場合は、K_POINTS に設定された k 点数からの相対値を入力します。

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。

esm_w
ESM が設置される場所のオフセットを設定します。

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。

fcp_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。

RISM(1) タブ

trism=.True.
RISM 計算を有効にします。ESM-RISM 計算を実行する際は、ここにチェックを入れ、*ESM* タブの *assume_isolated=esm* にもチェックを入れてください。この機能を利用するには、ESM-RISM 機能が有効になったバージョンの Quantum ESPRESSO を別途インストールする必要があります。

closure
RISM 計算で使用するクロージャを選択します。

tempv
RISM 計算の温度を指定します。

ecutsolv
RISM 計算のカットオフエネルギーを指定します。

solute_lj
溶質（DFT 領域）の LJ パラメータを指定します。 *none* を選択した場合は、その下の *solute_epsilon* と *solute_sigma* に LJ パラメータを入力してください。

nsolv
溶媒の分子種の数を指定します。

SOLVENTS
Density の単位をプルダウンから選択し、各溶媒分子種の密度（濃度）と MOL ファイルの名前を指定します。MOL ファイルは下の *Directory for MOL Files* で指定したフォルダに収められている必要があります。

Directory for MOL Files
SOLVENTS で選択できる MOL ファイルを収めたフォルダを指定します。

RISM(2) タブ

laue_expand_right/left
ESM-RISM 計算における溶媒領域の遠方側の端の位置を指定します。

laue_starting_right/left
ESM-RISM 計算における溶媒領域の開始位置を指定します。

laue_buffer_right/left
ESM-RISM 計算における溶媒のバッファ領域の位置を指定します。

Run only 1D-RISM
ここをチェックした場合は、pw.x の代わりに 1drism.x を実行します。DFT 計算は実行されません。溶媒原子間相関関数や溶媒間の化学ポテンシャルのみを知りたいときに有効です。

rism3d_conv_level
SCF 計算の各ステップにおける 3D-RISM 計算の打ち切り誤差を、動的に変化させる際のパラメータを指定します。

rism1d/rism3d_maxstep
1D および 3D-RISM の最大反復回数を指定します。

rism1d/rism3d_conv_thr
1D および 3D-RISM の打切り誤差を指定します。

mdiis1d/3d_size
MDIIS アルゴリズムによる RISM 計算の収束パラメータを指定します。

mdiis1d/3d_step
MDIIS アルゴリズムによる RISM 計算の収束パラメータを指定します。

Others 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。

Preview タブ
設定キーワードのプレビューが表示されます。

Options タブ

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。

Options for executable
pw.x や pw.exe を実行するコマンドの引数を与えます。例えば並列を制御する-nk, -nb, -nt, -nd などを指定できます。

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。

QE Version
出力する QE の入力ファイルが対応する QE のバージョンを指定します。いくつかのキーワード（&fcp, HUBBARD など）の出力形式はバージョンによって変化します。

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。

Pseudopotential 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。

Pseudopotential
系内の全元素に共通して存在する中から擬ポテンシャルファイルを選択します。

(Type)
擬ポテンシャルの種類を選択します。

(Functional)
汎関数の種類を選択します。(Type) で絞られた選択肢の中から選択します。

(File)
擬ポテンシャルファイルを選択します。(Type) と (Functional) で絞られた選択肢の中から選択します。(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。ユーザ設定フォルダの中の `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。

Reset
設定をリセットします。

Import
設定ファイルを読み込みます。

Export
設定ファイルを出力します。

Spacing パラメータ

Spacing パラメータは系のサイズによらず各方向の k 点分割数 N を決めるためのパラメータです。

$$N = \max(1, \mathrm{ceiling}(|\vec{b}_i|/\mathrm{Spacing}))$$

$\vec{b}_i$（i は各方向 $0, 1, 2$ に対するインデックス）は格子ベクトル（基本並進ベクトル）$\vec{a}_i$ に対する逆格子ベクトル $\vec{a}_i\vec{b}_i = 2\pi\delta_{ij}$ です。

6.16.4 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、作業フォルダ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 を作業フォルダとして使用します。
- *Output Directory* = *Select* の時は、選択したフォルダを作業フォルダ（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 si.pwout	計算のログファイルです。
bat ファイル si.bat	Quantum ESPRESSO を実行するためのバッチファイルです。
作業フォルダ si_qe_data\	作業フォルダです。

作業フォルダ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 環境変数は作業フォルダに設定されます。
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: 作業フォルダ

- 作業フォルダとは、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、作業フォルダの名前は 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フォルダ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フォルダ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、作業フォルダが 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。**

ジョブは *Winmostar Job Manager* を通じて実行されます。

6.16.5 ログを表示

ログファイルをテキストエディタで開きます。

6.16.6 ログの抜粋を表示

ログファイルの主要な情報を抜粋して表示します。

6.16.7 アニメーション

構造最適化/BOMD(pwout)

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(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 **アニメーション操作エリア** を参照してください。アニメーション操作エリアから動径分布関数、自己拡散係数、平均二乗変位、各原子の変位などを計算できます。

CPMD(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 **構造最適化**/*BOMD(pwout)* を使用してください。

アニメーション表示の操作方法は **アニメーション操作エリア** を参照してください。アニメーション操作エリアから動径分布関数、自己拡散係数、平均二乗変位、各原子の変位などを計算できます。

6.16.8 エネルギー変化

SCF エネルギー変化 (pwout)

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。

Property
: グラフ表示する値を選択します。

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。

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。

6.16.9 結果解析

状態密度

作業フォルダ (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。

フェルミエネルギー付近の状態密度が 0 となるエネルギーの範囲が内部的に計算され、バンドギャップ、VBM（価電子帯上端）、CBM（伝導帯下端）のエネルギーの値が算出され表示されます。

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。

部分状態密度

作業フォルダ (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。

Check atom using viewport
ログファイルから読み込まれた分子構造が 3D 表示されます。そこでクリックして選択された原子の軌道が、軌道のリストの中でチェックされます。

Show band center
各軌道のバンド中心を計算します。d バンド中心などを取得することができます。積分範囲に伝導帯を含めるか否かを選択できます。

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。

バンド構造

作業フォルダ (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。

Lowdin 電荷

作業フォルダ (outdir) を指定し、Lowdin 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。

Bader 電荷

作業フォルダ (outdir) を指定し、Bader 電荷を算出・表示します。あらかじめ PAW 法で全電子密度の cube ファイルを生成しておく必要があります。

バックグラウンドで bader プログラムが流れます。

電子密度

作業フォルダ (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 *Surface Setup・Cubegen* **ウィンドウ** を参照してください。

スピン密度

作業フォルダ (outdir) を指定し、等スピン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 *Surface Setup・Cubegen* **ウィンドウ** を参照してください。

ポテンシャルエネルギー

作業フォルダ (outdir) を指定し、等ポテンシャルエネルギー面を表示します。

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 *Surface Setup・Cubegen* **ウィンドウ** を参照してください。

ポテンシャルエネルギー分布

作業フォルダ (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（交換相関エネルギーを除く）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（交換相関エネルギーを除く）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。

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。

誘電関数

誘電関数計算後の作業フォルダを指定し、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。

NMR

GIPAW 計算後の作業フォルダを指定し、NMR スペクトルを表示します。

サブウィンドウの操作方法は *NMR* **ウィンドウ** を参照してください。

IR/ラマンスペクトル

フォノン計算後の作業フォルダと 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。

フォノン分散曲線

フォノン分散計算後の作業フォルダを指定し、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 2pi/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。

フォノン状態密度

フォノン分散計算後の作業フォルダを指定し、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。

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。

1D-RISM RMS 変化 (pwout)

RISM 計算（trism=.True.）の最初に実行される 1D-RISM 計算の RMS の変化をプロットします。

Draw
グラフを表示します。

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。

3D/Laue-RISM RMS 変化 (pwout)

RISM 計算（trism=.True.）実行時の、最後の SCF ステップにおける 3D-RISM または ESM-RISM 計算の RMS の変化をプロットします。

Draw
グラフを表示します。

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。

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。

Obtain Chemical Potentials
溶媒分子間の化学ポテンシャルを csv 形式で出力します。

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。

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。

6.16.10 MOL ファイルを作成

RISM 計算（trism=.True.）で使用される溶媒の MOL ファイルを作成します。溶媒分子を 1 分子メインウィンドウに作成した上で本機能を呼び出してください。LAMMPS の data 形式のファイルから LJ パラメータを設定したい場合は、data 形式のファイルをメインウィンドウで開いた上で *Use parameters in displayed file* にチェックを入れてください。

作成したファイルは MOL ファイルのキーワード設定ウィンドウの *RISM(1)* タブの *Directory for MOL Files* で指定したフォルダに配置してください。

6.16.11 Nudged Elastic Band

ワークフロー設定/キーワード設定

NEB 計算の条件を設定し実行します。NEB の実行には `neb.x` を使います。

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。

6.16.12 実行

ファイルモードで Quantum ESPRESSO の NEB 計算を実行します。

ログを表示

NEB 計算のログファイルをテキストエディタで開きます。

NEB エラー変化

NEB 計算の各 iteration におけるエラーを表示します。

アニメーション

NEB 計算の出力ファイルを指定し、NEB 計算収束後の後の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。NEB 計算の各 iteration におけるエネルギーの変化を連続的に確認したい場合は **エネルギー分布** を利用してください。

アニメーション表示の操作方法は **アニメーション操作エリア** を参照してください。

エネルギー分布

NEB 計算の出力ファイルを指定し、反応座標に沿ったエネルギーの変化を表示します。NEB 計算の各 iteration における様子を可視化できます。原子構造を可視化したい場合は **アニメーション** を使用してください。

6.16.13 BoltzTraP

BoltzTraP では、QuantumESPRESSO での nscf 計算のアウトプットをもとに熱電特性の計算を行います。

キーワード設定・実行

BoltzTraP を用いたプリ・ポスト処理の計算条件を設定し、プリ処理の実行を行います。

Create .intrans **ファイル** ボタン

Quantum ESPRESSO の nscf 計算のアウトプットファイル (*.pwout)* **を読み込み、***BoltzTraP* **設定ファイル (**.intrans) を生成します。アウトプットファイルを仮に mg2si_nscf.pwout とすると、同じ階層に mg2si_nscf という名前の作業フォルダを生成します。mg2si_nscf.intrans は mg2si_nscf 内に生成されます。

intrans ファイルの作成に成功した場合、ファイルの内容を読み込み、下記キーワードの入力欄に反映します。

Fermilevel (Ry)
pwout ファイルから読み込んだフェルミエネルギーが設定されています。

energy grid
設定エネルギーの間隔を指定します。

energy span
フェルミレベル周辺の計算に考慮に入れるバンドエネルギーの範囲を指定します。

number of electrons
単位格子内の電子の個数を指定します。

lpfac
バンドエネルギーをフーリエ展開によって補完する際の因子を指定します。

efcut
化学ポテンシャルを変えて計算する範囲を指定します。

Tmax
設定温度の上限値を指定します。

temperature grid
設定温度の間隔を指定します。

energy of bands
DOS から得られたバンドのエネルギー幅を指定します。

Calculate expansion coeff
チェックが入っている場合、展開係数を計算します (CALC)。入っていない場合、展開係数をファイルから読み込みます (NOCALC)。

Start BoltzTraP ボタン

設定条件を元に intrans ファイルを再作成し、BoltzTraP を実行します。このとき、以下のファイルとフォルダが生成されます。

下記では、計算終了時点での作業フォルダ（mg2si_nscf）内の主なファイルを記載します。

種類	説明
.intfans ファイル `mg2si_nscf.intrans`	BoltzTraP のインプットファイルです。
.trace ファイル `mg2si_nscf.trace`	BoltzTraP で計算された熱電特性のエネルギー、温度依存性に関する情報が出力されたファイルです。BoltzTraP 結果読み込みメニューではこのファイルを読み込み可視化を行います。

Cancel ボタン

何もせずにキーワード設定・実行ウィンドウを閉じます。

結果読み込み

BoltzTraP によって計算された下記の熱電特性を読み込み、可視化を行います。

- ゼーベック係数 (Seebek coefficient)
- 電気伝導度 (Electrical conductivity)
- 熱伝導率 (Electrical thermal conductivity)
- 出力因子 (Power factor)
- 性能指数 (Figure of merit)

各温度における特性値のエネルギー依存性を表示したい場合はコンボボックスから T [K] を選択し、リストから目的の温度を選択します。各エネルギーにおける特性値の温度依存性を表示したい場合はコンボボックスから E-Ef [eV] を選択し、リストから目的のエネルギーを選択します。

6.16.14 Phonopy

Phonopy を用いた計算を以下の 3 つの工程で計算を行います。

1. 与えられた結晶構造（プロジェクトモード）または Quantum ESPRESSO インプットファイル（ファイルモード）を元にスーパーセルを作成する。
2. 生成された全てのスーパーセルに対し、Quantum ESPRESSO を実行する。
3. Quantum ESPRESSO のアウトプットファイルから、ForceSets ファイルを作成し、Phonon バンド、DOS、熱物性などの計算を行う。

スーパーセルを作成

プロジェクトモードにおいて、分子表示エリアに表示されている結晶構造に対し Phonopy 計算用のスーパーセルを生成します。結晶の種類によって複数の構造が生成されることがあります。それらの構造に対し Quantum ESPRESSO で計算をするには、**ワークフロー設定** で Enable scan calculation を使用します。

キーワード設定・実行

ファイルモードにおいて、Phonopy を用いたプリ・ポスト処理の計算条件を設定し、プリ処理の実行を行います。

***Open* ボタン**
Quantum ESPRESSO のインプットファイル (*.in,*.pwin) を読み込みます。Phonopy でのポスト処理では、応力の情報を必要とします。このため読み込むファイルは tprnfor, tstress キーワードを含んでいる必要があります。Phonopy 用の Quantum ESPRESSO のインプットファイルは、Quantum ESPRESSO キーワード設定の Preset=Phonopy を使用することで設定できます。

DIM
スーパーセルの x, y, z 方向のリピート回数を半角スペース区切りで指定します。

MP
Phonopy で Phonon DOS や熱物性の計算を行う際の逆格子を半角スペース区切りで指定します。

ATOM_NAME
単位格子に含まれる元素を半角スペース区切りで指定します。*Open* ボタンでインプットファイルを開いた時点で自動的に入力されます。

Start ボタン

設定条件を元に Phonopy を実行し、プリ処理であるスーパーセルの作成を実行します。このとき、以下のファイルとフォルダが生成されます。

種類	説明
bat ファイル `si.bat`	Phonopy のプリ処理を実行するためのバッチファイルです。
sh ファイル `si.sh`	Phonopy のプリ処理を実行するためのシェルスクリプトファイルです。
si_ph_data フォルダ `si_ph_data`	計算の作業フォルダです。

作業フォルダ si_ph_data には以下のファイルが生成されます。

種類	説明
mesh.conf ファイル `mesh.conf`	Phonopy のポスト処理にて、状態密度や熱物性を計算するときに使用されます。
band.conf ファイル `band.conf`	Phonopy のポスト処理にて、バンド構造を計算するときに使用されます。
header ファイル `header.in`	si.pwin で指定された構造情報以外のキーワード情報が記載されています。
supercell ファイル `supercell-*.in`	Phonopy により生成されたスーパーセルの情報が Quantum ESPRESSO のインプットファイル形式で記載されています。 スーパーセルのパターンは複数生成されるため、*の部分には 1, 2, などの数字が入ります。
tmp ファイル `tmp-*.in`	header.in と supercell-*.in を結合したファイルです。

Cancel ボタン

何もせずにキーワード設定・実行ウィンドウを閉じます。

conf ファイル編集

ファイルモードにおいて、conf ファイルをテキストエディタで開きます。キーワード設定画面で設定したキーワードを編集したい場合に用います。

Quantum ESPRESSO 連続実行

ファイルモードにおいて、キーワード設定・実行画面で生成された、全てのスーパーセルに対し、Quantum ESPRESSO を実行します。このメニューを用いた場合、Quantum ESPRESSO はローカル環境で実行されます。

Phonopy 実行

ファイルモードにおいて、Phonopy のポスト処理を実行します。

この時、作業フォルダ :file: si_ph_data に以下のファイルが生成されます。

種類	説明
sh ファイル `phonopy.sh`	Phonopy のポスト処理を実行するためのシェルスクリプトです
band.yaml ファイル `band.yaml`	Phonopy のポスト処理で計算されたバンド構造の情報が出力されています。
dos.dat ファイル `dos.dat`	Phonopy のポスト処理で計算された状態密度の情報が出力されています。
thermal_properties.yaml ファイル `thermal_properties.yaml`	Phonopy のポスト処理で計算された熱物性の情報が出力されています。

バンド構造

作業フォルダに含まれる band.csv をもとにバンド構造を表示します。

状態密度

作業フォルダに含まれる toal_dos.csv をもとに状態密度を表示します。

熱物性

作業フォルダに含まれる thermal_properties.csv をもとに熱物性を表示します。

6.16.15 弾性定数テンソル

弾性定数テンソルを計算します。あらかじめ **構造スキャン** 機能で Generate all strain modes に設定して生成した構造に対し、構造スキャン計算を実行しておく必要があります。

6.17 固体 → *OpenMX* メニュー

OpenMX に関するメニューです。

6.17.1 OpenMX の設定方法

Winmostar のワークフロー設定・キーワード設定で読み込む VPS, PAO ファイルは、CygwinWM の環境変数 OPENMX_DATA_PATH で指定されたパスから読み込まれます。また、リモートジョブにおいては、リモートサーバ上に CygwinWM 上の OpenMX と同じバージョンの OpenMX をインストールする必要があり、リモートサーバ上でも CygwinWM と同様の環境変数 OPENMX_DATA_PATH を設定する必要があります。

OpenMX3.8 以前の DFT_DATA13 を使う場合は、UserPref フォルダに wm_systemwmx フォルダの omxprm_dft_data13.txt を omxprm.txt としてコピーすると、VPS, PAO ファイルに関し、DFT_DATA13 に対応した推奨設定がデフォルトで使われるようになります。

6.17.2 ワークフロー設定

プロジェクトモードにおける OpenMX の計算フローを設定、実行します。

Preset
設定のプリセットを呼び出し、保存します。

# of Jobs
ジョブの数を指定します。

Enable parameter/structure scan
この機能を使うためにはアドオンの購入が必要です。特定のパラメータだけが異なる複数の計算を流したり（パラメータスキャン）、複数の構造に対し同一のパラメータで計算を流す（構造スキャン）ことが可能となります。

Config をクリックするとスキャン計算の設定画面が出現します。

パラメータスキャンの際は *Target Variable* に%WM_SCAN1%を選択し、 *Values* の各行に%WM_SCAN1%に設定したいパラメータを入力します。そして、ワークフロー設定ウィンドウまたはキーワード設定ウィンドウにおいて設定したいパラメータに%WM_SCAN1%と入力します。Values の各行にスペース区切りで値が記入されている場合は、1 列目の値を%WM_SCAN1_1%、2 列目の値を%WM_SCAN1_2%... といった具合に参照することができます。

並列数をスキャンしたい場合は、# of Threads または# of Procs を選択します。

構造スキャンの際は、分子表示エリアでアニメーションが出現した状態（SDF ファイルを開くなど）で、 *Target Variable* に%WM_STRUCT%を選択します。また、構造スキャン実行時には作業フォルダに label_scan_struct.txt というファイル名で、アニメーション表示エリアのリストの文字列が保存されます。

スキャン計算の終了後は **ファイル** → **プロジェクト** → **スキャン結果表示** を利用して計算結果を集計します。

Import
Export で出力した設定を読み込みます。ボタン右の矢印をクリックすると、過去同じプロジェクトまたは Winmostar 上で使用した設定を呼び出すことができます。

Export
設定をファイルに出力します。

OK
設定した内容で計算を実行またはファイルを生成します。詳しくは **プロジェクトモードの場合** を参照してください。

Details
計算条件を詳細に設定します。 **キーワード設定** が立ち上がります。

Task
計算の種類を指定します。

	設定内容
Energy	MD.Type=nomd
Optimize(Atom)	MD.Type=Opt
Optimize(Atom&Cell)	MD.Type=RFC5
BOMD	MD.Type=NVE

Charge
系全体の電荷を指定します。

Spin
スピン分極計算の設定をします。

K points
K 点の計算方法を指定します。

Pressure
圧力を指定します。

Functional
汎関数を指定します。

Properties
計算時に合わせてチェックを入れた物性を計算します。

Precision
計算精度を設定します。

	設定内容
Extra-low	SCF.criterion=5e-6 MD.Opt.criterion=5e-3 KSpacing=0.44(metal) 0.63(nonmetal) SCF.EnergyCutoff=80(metal) 80(nonmetal)
Low	SCF.criterion=5e-7 MD.Opt.criterion=5e-4 KSpacing=0.44(metal) 0.63(nonmetal) SCF.EnergyCutoff=120(metal) 120(nonmetal)
Medium	SCF.criterion=1e-7 MD.Opt.criterion=2.5e-4 KSpacing=0.31(metal) 0.50(nonmetal) SCF.EnergyCutoff=160(metal) 160(nonmetal)
High	SCF.criterion=5e-8 MD.Opt.criterion=1.5e-4 KSpacing=0.25(metal) 0.44(nonmetal) SCF.EnergyCutoff=300(metal) 200(nonmetal)
Extra-High	SCF.criterion=2.5e-8 MD.Opt.criterion=5e-5 KSpacing=0.08(metal) 0.11(nonmetal) SCF.EnergyCutoff=600(metal) 400(nonmetal)

Metal
スメアリングを有効にします。有効の場合は SCF.ElectronicTemperature を 800、無効の場合は 300 にし、Precision（上記）の内容も調整します。

6.17.3 キーワード設定

OpenMX 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。*OK* ボタンで設定内容を反映してメイン画面に戻ります。*Cancel* ボタンで何もせずに Window を閉じます。

本機能を呼び出すときに、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** *(Primitive-Conventional)* が実行されます。

Preset
設定のプリセットを選択します。

Use MPI
OpenMX 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。

Use OpenMP
OpenMX の実行時に OpenMP を用いて並列計算を実行するか指定します。横の欄には OpenMP スレッド数を入力します。

Basic タブ

Restart
引き継ぎ元ジョブの最終状態を引き継ぐ場合は On にします。

Restart Directory
Restart=Off 以外の場合に引き継ぐジョブの rst フォルダを指定します。

XcType
交換相関ポテンシャルを指定します。「LDA」、「LSDA-CA」、「LSDA-PW」、「GGA-PBE」が指定できます。ここで「LSDA-CA」は Ceperley-Alder の局所スピン密度関数、「LSDA-PW」は、その GGA 形式において密度勾配をゼロとした Perdew-Wang 局所スピン密度関数です。「GGA-PBE」は Perdew らが提案する GGA 汎関数です。

EigenvalueSolver
固有値問題の計算手法を「scf.EigenvalueSolver」で指定します。O(N) 分割統治法は「DC」、O(N) クリロフ部分空間法は「Krylov」、 数値厳密な低次スケーリング法は「ON2」、クラスタ計算は「Cluster」、バンド計算は「Band」を指定します。

Specify Kgrid by spacing
Kgrid を Spacing パラメータ（ *Spacing* **パラメータ** ）で設定します。

Kgrid
OpenMX では等間隔メッシュにより k 空間の第 1 ブリルアンゾーンを離散します。その際、「scf.EigenvalueSolver」キーワードにて「Band」を指定する場合、k 空間の第 1 ブリルアンゾーンを離散化するための 格子の数（n1, n2, n3）を「scf.Kgrid」キーワードで指定しなければなりません。k 空間の逆格子ベクトルを離散化するために「n1 n2 n3」のように指定して下さい。

energycutoff
積分グリッド間隔を定義するカットオフエネルギーを指定します。この積分グリッドは差電子クーロンポテンシャルと交換相関ポテンシャルに対する行列要素の計算、および高速フーリエ変換（FFT）を用いた Poisson 方程式の 解法のために使用されます。

System.Charge
系全体の電荷を指定します。

ElectronicTemperature
電子温度（K）を設定します。

MD.Type
分子動力学計算あるいは構造最適化のタイプを指定します。 現在使用できるオプションは以下の通りです。MD 無し（「Nomd」）、原子座標の構造最適化（「Opt」）、ユニットセルの自由度も含めた構造最適化（「RFC5」）、NVE アンサンブル MD（「NVE」）、速度スケーリング法による NVT アンサンブル MD（「NVT_VS」）、Nose-Hoover 法による NVT アンサンブル MD（「NVT_NH」）

Advanced(1) タブ

criterion
SCF 計算の収束条件を指定します（Hartree 単位）。 SCF 反復は dUele < scf.criterion という条件が満たされると終了します。ここで dUele とは、現在の SCF 反復とひとつ前の反復とのバンドエネルギーの絶対差です。 デフォルト値は 1.0e-6（Hartree 単位）です。

maxIter
SCF の最大反復回数を設定します。 SCF 反復ループは、収束条件が満たされない場合でもこのキーワードで指定した回数で終了します。

Mixing.Type
SCF 計算の次の反復ステップに入力される電子密度 (もしくは密度行列) を生成するための電子密度混合法を指定します。単純混合法（「Simple」）、Guaranteed-Reduction Pulay 法（「GR-Pulay」）、RMM-DIIS 法（「RM-DIIS」）、 Kerker 法（「Kerker」）、あるいは RMM-DIISK 法（「RMM-DIISK」）、 RMM-DIISH 法（「RM-DIISH」）のいずれかを指定することができます。OpenMX の単純混合法は収束の速度を上げるために収束履歴を参照するように改良されています。「GR-Pulay」、 「RMM- DIIS」、 「Kerker」あるいは「RMM-DIISK」を使用する際には、以下の点に注意することで SCF 計算の高速化が可能です。* Pulay 法に準拠する方法で混合を開始する前にある程度の収束が必要です。そのため、やや大きめの「scf.Mixing.StartPulay」の値を使用します。 「scf.Mixing.StartPulay」の適切な値は 10〜30 です。* 金属系の場合は高い「scf.ElectronicTemperature」の値を使用します。 「scf.ElectronicTemperature」が小さいと数値的に不安定な挙動がよく見られます。* 「scf.Mixing.History」の値を大きくします。ほとんどの場合、「scf.Mixing.History=30」が妥当な値です。また前述した混合法のうち、一番ロバスト性が高いのは「RMM-DIISK」です。

Init.Mixing.Weight
単純法、GR-Pulay 法, RMM-DIIS 法、Kerker 法、RMM-DIISK 法および RMM-DIISH 法で使用する初期の混合比を指定します。 有効な範囲は 0<Init.Mixing.Weight<1 です。

Min.Mixing.Weight
単純および Kerker 混合法における混合比の下限を指定します。

Max.Mixing.Weight
単純および Kerker 混合法における混合比の上限を指定します。

Mixing.History
GR-Pulay 法、RMM-DIIS 法、 Kerker 法、RMM- DIISK 法及び RMM-DIISH 法では、SCF の次の反復ステップにおける入力電子密度（ハミルトニアン）を、過去の SCF 反復の電子密度（ハミルトニアン）に基づき推定します。「scf.Mixing.History」キーワードは、この推定に使用する過去の SCF 反復ステップ数を指定します。例えば、「Mixing.History」が 3 に設定されている場合、6 回目の SCF 反復では過去の第 5、4、3 ステップの電子密度が考慮されます。

Mixing.StartPulay
GR-Pulay 法、RMM-DIIS 法、Kerker 法、RMM-DIISK 法および RMM-DIISH 法を開始す

る SCF ステップを指定します。 これらの方法を開始するまでの SCF ステップでは単純あるいは Kerker 混合法が使用されます。

lapack.dste
LAPACK ルーチンを選択します。

ProExpn.VNA
中性原子ポテンシャル VNA を射影演算子で展開する場合には、「ON」に設定し、 それ以外の場合は「OFF」を設定して下さい。「OFF」と設定されている場合、VNA ポテンシャルの行列要素は実空間の離散グリッドを用いて計算されます。

HoppingRanges
各原子を中心とする球の半径 (Å) を定義します。DC 法および O(N) クリロフ部分空間法では、この球内に含まれる原子を選択することで切り取られたクラスタが構成されます。

KrylovH.order
切り取られた各クラスタのハミルトニアンに対し、クリロフ部分空間の次元を指定します。

KrylovS.order
後述のキーワードで「Exact.Inverse.S=off」に設定した場合、重なり積分の逆行列は クリロフ部分空間法を用いて近似されます。 この時、切り取られた各クラスタに対する重なり行列のクリロフ部分空間法の次元を指定します。

Exact.Inverse.S
「on」に設定すると、切り取られた各クラスタの重なり行列の逆行列は厳密に評価されます。 「off」に設定する場合は前述のキーワード「KrylovS.order」の項を参照して下さい。

Recalc.Buffer
「on」に設定すると、バッファ行列は各 SCF 反復毎に再計算されます。 「off」の場合にはバッファ行列は初回の SCF ステップで計算され、その後の SCF 反復では固定されます。

Expand.Core
「on」に設定すると、コア領域は半径 1.2 × r_{min} の球の中にある 原子から構成されます。ここで r_{min} は、中心原子と最隣接原子間の距離です。このコア領域はクリロフ部分空間を生成するときの第 1 ステップで使用されるベクトル群を定義します。「off」の場合、中心の原子がコア領域と見なされます。

Advanced(2) タブ

maxIter
MD 計算や構造最適化計算における最大の反復回数を指定します。

Opt.criterion
「Type」キーワードによって構造最適化の方法を選択している場合には、「Opt.criterion」キーワードでその収束条件（Hartree/Bohr） を設定します。原子にかかる力の最大絶対値が、ここで指定した値より小さくなった場合に、構造最適化は終了します。

Opt.DIIS.History
「DIIS」、「EF」、「RF」による構造最適化を行う場合、「Opt.DIIS.History」キーワードは構造最適化のために参照する過去のステップ数を指定します。

Opt.StartDIIS
「DIIS」、「EF」、「RF」による構造最適化を開始するステップを「Opt.StartDIIS」キーワードで指定します。DIIS タイプの構造最適化を開始する以前のステップでは最急降下法が使用されます。

Opt.EveryDIIS
「DIIS」、「EF」、「RF」による構造最適化と最急降下法による構造最適化を切り替える頻度を指定します。MD.Type=Opt の時はこの設定は無視されます。

Spin/DFT+U タブ

SpinPolarization
電子系の非スピン分極あるいはスピン分極を指定します。 スピン分極の計算を行う場合は「ON」を指定し、非スピン分極の計算を行う場合は「OFF」を指定します。前述の 2 つのオプションの他、ノンコリニア DFT 計算を行う場合には「NC」というオプションを指定して下さい。スピン分極計算では、メインウィンドウで各原子に設定されたスピン密度（Up スピンと Down スピンの電子数の差と解釈されます）に応じて初期スピン密度が設定されます。スピン密度は **電荷/スピンを変更** などで設定することができます。

SpinOrbit.Coupling
スピン軌道相互作用を指定します。

Constraint.NC.Spin
ノンコリニアスピン方位に対する制約条件付き DFT 計算を実行するか指定します。

Constraint.NC.Spin.V
ノンコリニアスピン方位に対する制約条件付き DFT 計算における制約の強さを指定します。

Hubbard.U
LDA+U および GGA+U 計算の場合、「ON」に設定します。

Hubbard.Occupation
LDA+U 法では、「onsite」、「full」および「dual」の 3 つの占有数演算子から選択することができます。

Restart.Spin.Angle.Theta
第二変分法による磁気異方性エネルギー計算に必要なスピン方位のオイラー角 (theta, phi) を指定します。

Restart.Spin.Angle.Phi
第二変分法による磁気異方性エネルギー計算に必要なスピン方位のオイラー角 (theta, phi) を指定します。

MD タブ

TimeStep
時間ステップ（fs）を指定します。

Applied.Pressure
圧力（GPa）を指定します。

NH.Mass.HeatBath
「Type」キーワードによって「NVT_NH」を選択した場合、このキーワードで熱浴の質量を設定します。単位は統一原子質量単位です（炭素原子の主同位体の質量を 12.0 とする単位）。

TempControl
MD および NVT アンサンブルにおける原子運動の温度を指定します。 「NVT_VS」を選択した場合、原子運動の温度を下記の例のように制御できます。:

```
<MD.TempControl
  3
  100   2  1000.0  0.0
  400  10   700.0  0.4
  700  40   500.0  0.7
MD.TempControl>
```

記述は「<MD.TempControl」で開始し、「MD.TempControl>」で終わります。最初の数字「3」は、続く温度指定の行数を指します。 例では 3 行あります。後続する行の第 1 列は MD ステップ数を指し、第 2 列は速度スケーリングを行う MD ステップの間隔を指定します。 例では、100 ステップ目までは 2 ステップ毎に、100〜400 ステップ間は 10 ステップ毎に、400〜700 ステップ間は 40 ステップ毎に速度スケーリングを行います。 第 3、4 列はそれぞれ温度（K）とスケーリングパラメータ α を指定します。 詳細は「分子動力学」の章を参照して下さい。 一方、NVT_NH の場合、以下の記述で原子運動の温度を制御できます。:

```
<MD.TempControl
  4
  1    1000.0
  100  1000.0
  400   700.0
  700   600.0
MD.TempControl>
```

記述は「<MD.TempControl」で開始し、「MD.TempControl>」で終わります。 最初の数字「4」は、続く温度指定の行数を指します。 この例では 4 行あります。 後続する行の第 1、2 列は、それぞれ MD ステップ数と原子運動の温度を指定します。 指定された MD ステップ間の温度は線形補完されます。

Others タブ

任意の OpenMX パラメータを入力します。

Preview タブ

設定キーワードのプレビューが表示されます。

Options タブ

level.of.stdout

標準出力への出力情報のレベルを指定します。「0」を指定した場合、最小限の情報が出力されます。「1」の場合、最小限の出力に加えて追加の情報が出力されます。「2」は開発者向けのオプションです。

level.of.fileout

出力ファイルへの出力情報のレベルを指定します。「0」を指定した場合、最小限の情報が出力されます（Gaussian cube およびグリッドファイルの出力無し）。「1」は標準的な出力情報レベルです。「2」の場合、標準の出力に加えて追加の情報が出力されます。

Atoms.Coord.Unit

原子座標の単位を指定します。

Edit and confirm Atoms.SpeciesAndCoordinates

Atoms.SpeciesAndCoordinates を直接編集します。

Properties タブ

dispersion

バンド分散を評価するには「ON」に設定します。

Use default path

自動判定されたブラベー格子の種類をもとにバンド分散を評価する際の k 点のパスを設定します。

DOS.fileout

全状態密度（DOS）および射影した部分状態密度（PDOS）を評価する場合は「ON」に設定します。

Erange
DOS 計算におけるエネルギー範囲（下限値と上限値）を半角スペース区切りで指定します。

Kgrid
DOS 計算を行う上で、第 1 ブリルアンゾーンを離散化するために (n1, n2, n3) の格子点を指定します。

MO.fileout
分子軌道をファイルに出力したい場合は、「ON」を指定します。

num_HOMOs
出力する最高被占分子軌道（HOMO）の数を指定します。

num_LUMOs
出力する最低空分子軌道（LUMO）の数を指定します。

Nkpoint
「fileout」を「ON」および SCF タブの「EigenvalueSolver」を「Band」を設定している場合、「Nkpoint」キーワードで MO を出力する k 点の数を指定します。

Species タブ

Atom
原子種の名前を指定します。

Basis
プリミティブ軌道の数および縮約された軌道の数を指定します。

PAO
擬原子基底軌道の拡張子無しのファイル名を指定します。

VPS
擬ポテンシャルの拡張無しファイル名を指定します。

Reset
設定をリセットします。

Import
設定ファイルを読み込みます。

Export
設定ファイルを出力します。

6.17.4 実行

OpenMX 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 `dia.mxin` 、System.Name が wm のときのファイル/フォルダ名を併記しています。

種類	説明
bat ファイル dia.bat	OpenMX を実行するためのバッチファイルです。CygwinWM 経由で dia.sh を実行します。
sh ファイル dia.sh	OpenMX を実行するためのシェルスクリプトファイルです。
log ファイル dia.log	dia.sh のログファイルです。
mxout ファイル dia.mxout	計算の出力ファイルです。作業フォルダ内の wm.out のコピーです。
作業フォルダ dia_mx_data\	作業フォルダです。

作業フォルダ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
tmp.dat	計算条件を指定するファイルです。 dia.mxin のコピーです。
tmp.std	OpenMX の標準出力をリダイレクトしたファイルです。
wm.out	SCF 計算の履歴、構造最適化の履歴、Mulliken 電荷、全エネルギー、および双極子モーメントが保存されます。
wm.xyz	MD または構造最適化により得られた最終的な幾何学的構造が保存されます。
wm.bulk.xyz	「scf.EigenvalueSolver=Band」の場合、コピーされたセルの原子を含む原子座標が出力されます。
wm.md	各 MD ステップごとの原子座標が保存されます。
wm.md2	最終 MD ステップにおける原子座標が保存されます。指定した原子種記号を用いて原子が指定されています。
wm.ene	MD ステップごとの計算値が保存されます。保存されている各数値の内容は「iterout.c」 ルーチン中で確認できます。
wm.Band	バンド分散のデータファイルが保存されています。
wm.Dos.val	状態密度を計算するための固有値のデータファイル。
wm.Dos.vec	状態密度を計算するための固有ベクトルのデータファイル。

ヒント：作業フォルダ

- 作業フォルダとは、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、作業フォルダの名前は `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フォルダ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フォルダ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、作業フォルダが `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。**

ジョブは *Winmostar Job Manager* を通じて実行されます。

6.17.5 ログを表示 (mxout)

ログファイルをテキストエディタで開きます。

6.17.6 ログの抜粋を表示

ログファイルの主要な情報を抜粋して表示します。

6.17.7 アニメーション (md)

md ファイルの情報から構造最適化、分子動力学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 **アニメーション操作エリア** を参照してください。アニメーション操作エリアから動径分布関数、自己拡散係数、平均二乗変位、各原子の変位などを計算できます。

6.17.8 エネルギー変化

SCF エネルギー変化 (std)

std ファイルを選択し、残差の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。

6.17.9 結果解析

状態密度

作業フォルダ (dia_mx_data\) を指定し、状態密度を表示します。

Dos.fileout=on で計算が終了している必要があります。

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。

部分状態密度

作業フォルダ (dia_mx_data\) を指定し、部分状態密度 (PDOS) を表示します。

Dos.fileout=on で計算が終了している必要があります。

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。

バンド構造

作業フォルダ (dia_mx_data\) を指定し、バンド構造を表示します。

Band.dispersion=on で計算が終了している必要があります。

電子密度/スピン密度/エネルギー分布

cube ファイルを指定し、電子密度、スピン密度、エネルギー分布を表示します。

サブウィンドウの操作方法は *Surface Setup・Cubegen* **ウィンドウ** を参照してください。

フェルミ面

作業フォルダ (dia_mx_data\) 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。

6.18 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
XANES 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 XANES スペクトルの電子殻を選択します。

Range
取得したい XANES 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力します。

Definition for Energy
XANES 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。

ジョブは *Winmostar Job Manager* を通じて実行されます。

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 結果解析

XANES スペクトル

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

6.19 固体 → *VASP* メニュー

VASP に関するメニューです。

6.19.1 VASP の設定方法

Winmostar からの VASP の実行についてはリモートジョブのみサポートされています。

リモートジョブのテンプレートスクリプト内で、VASP のバイナリ (vasp_std, vasp_gam, vasp_ncl など) に PATH 環境変数を通し、PATH_POTCAR_PAW_LDA, PATH_POTCAR_PAW_GGA, PATH_POTCAR_PAW_PBE という変数にそれぞれ LDA, GGA, PBE の POTCAR ファイルがまとめられているディレクトリを指定する必要があります。

実際に計算に使う VASP のバイナリは、VASP ワークフロー設定の Details または VASP キーワード設定の Basic タブの VASP Executable で選ぶことができます。gam, std, ncl などのバイナリをテンプレートスクリプトの編集なく Winmostar 上で使い分けたい場合は、それらの実行ファイルに別名を付けて PATH を通します（vasp_gam, vasp_std, vasp_ncl など）。リモートジョブの Test Connection 機能では vasp_std が暗黙で使用されます。

PATH_POTCAR_PAW_LDA, PATH_POTCAR_PAW_GGA, PATH_POTCAR_PAW_PBE で指定したディレクトリの下には、(元素名)/POTCAR というディレクトリ構成でファイルが置かれている想定になっています。元素名のディレクトリの下に POTCAR ではなく POTCAR.Z だけが置かれている場合は自動的に POTCAR が解凍されます。

6.19.2 ワークフロー設定

プロジェクトモードにおける Vasp の計算フローを設定、実行します。

Preset
設定のプリセットを呼び出し、保存します。

# of Jobs
ジョブの数を指定します。

Enable parameter/structure scan
この機能を使うためにはアドオンの購入が必要です。特定のパラメータだけが異なる複数の計算を流したり（パラメータスキャン）、複数の構造に対し同一のパラメータで計算を流す（構造スキャン）ことが可能となります。

Config をクリックするとスキャン計算の設定画面が出現します。

パラメータスキャンの際は *Target Variable* に%WM_SCAN1%を選択し、 *Values* の各行に%WM_SCAN1%に設定したいパラメータを入力します。そして、ワークフロー設定ウィンドウまたはキーワード設定ウィンドウにおいて設定したいパラメータに%WM_SCAN1%と入力します。Values の各行にスペース区切りで値が記入されている場合は、1 列目の値を%WM_SCAN1_1%、2 列目の値を%WM_SCAN1_2%... といった具合に参照することができます。

並列数をスキャンしたい場合は、# of Threads または# of Procs を選択します。

構造スキャンの際は、分子表示エリアでアニメーションが出現した状態（SDF ファイルを開くなど）で、 *Target Variable* に%WM_STRUCT%を選択します。また、構造スキャン実行時には作業フォルダに label_scan_struct.txt というファイル名で、アニメーション表示エリアのリストの文字列が保存されます。

スキャン計算の終了後は **ファイル** → **プロジェクト** → **スキャン結果表示** を利用して計算結果を集計します。

Import
Export で出力した設定を読み込みます。ボタン右の矢印をクリックすると、過去同じプロジェクトまたは Winmostar 上で使用した設定を呼び出すことができます。

Export
設定をファイルに出力します。

OK
設定した内容で計算を実行またはファイルを生成します。詳しくは **プロジェクトモードの場合** を参照してください。

Details
計算条件を詳細に設定します。 **キーワード設定** が立ち上がります。

Task
計算の種類を指定します。

	設定内容
Energy	IBRION=-1 ISIF=0 NSW=0
Optimize(Atom)	IBRION=1 ISIF=0 NSW=50
Optimize(Atom&Cell)	IBRION=1 ISIF=3 NSW=50
BOMD	IBRION=0 ISIF=0 NSW=50

Functional
使用する擬ポテンシャルおよび汎関数を選択します。

Cutoff energy
カットオフエネルギーを明示的に設定する場合にその値を指定します。

Manually specify cutoff energy
カットオフエネルギーを明示的に設定します。

Precision
計算精度を設定します。

	設定内容
Medium	PREC=Normal
High	PREC=Accurate

6.19.3 キーワード設定

VASP 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。*OK* ボタンで設定内容を反映してメイン画面に戻ります。*Cancel* ボタンで何もせずに Window を閉じます。

本機能を呼び出すときに、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** *(Primitive-Conventional)* が実行されます。

Basic タブ

VASP Executable
計算に使用する VASP の実行バイナリ名を指定します。

NCORE
各軌道の計算に使われるコア数を指定します。

NPAR
合計コア数÷ NCORE を指定します。

PREC
計算精度を一括設定します。

NBANDS
計算に使用する KS 軌道の数を指定します。

K-point
「by KSPACING and KGAMMA」の場合は KSPACING と KGAMMA キーワードで K 点を設定します。「by KPOINTS file」の場合は KPOINTS file を用いて K 点を設定します。

KSPACING
K 点の密度を指定します。

KGAMMA
K 点が Γ 点を含むか指定します。

KPOINTS file
KPOINTS ファイルに記載する内容を入力します。

ISYM
対称性の取り扱いを指定します。

ENCUT
波動関数のカットオフエネルギーを指定します。

NELECT
電子数を指定します。

ISMEAR
スメアリングの方法を指定します。

IBRION
計算のモードを指定します。(SCF 計算、MD 計算、構造最適化計算など)

ISIF
力・圧力計算の有無、原子位置、セルの更新有無について指定します。

Advanced タブ

EDIFF
SCF 計算の打切り誤差を指定します。

EDIFFG
構造最適化計算の打切り誤差を指定します。

NELM
SCF 計算の最大反復回数を指定します。

NELMIN
SCF 計算の最小反復回数を指定します。

NSW
構造最適化計算の最大反復回数を指定します。

TIME
一部のアルゴリズムにおける時間刻みを指定します。

ALGO
SCF 計算のアルゴリズムを指定します。

NSIM
RMM-DIIS 法利用時に同時に最適化されるバンド数を指定します。

INIWAV
ISTART=0 の時の軌道の初期値の発生方法を指定します。

SIGMA
スメアリング幅を指定します。

IVDW
分散力補正の方法を指定します。

GGA
LDA または GGA 汎関数を指定します。

LHFCALC
厳密交換項の計算有無を指定します。

HFSCREEN
厳密交換項の range-separation parameter を指定します。

PRECFOCK
厳密交換項の計算で使う FFT グリッドを指定します。

VOSKOWN
Vosko-Wilk-Nusair interpolation を使用するか否か指定します。

ADDGRID
Augmentation Charge のための追加グリッドを使用するか指定します。

LASPH
PAW 球内の電子密度勾配に関係する非球状成分を含めるか指定します。

LREAL
射影演算子を実空間または逆空間で評価するか指定します。

Spin タブ

ISPIN
スピン分極計算について指定します。

MAGMOM
各原子の初期スピンを指定します。

Output タブ

NWRITE
OUTCAR ファイルへ出力する情報量を調整します。

LWAVE
計算の最後に WAVECAR ファイルに波動関数の情報を出力するか指定します。

LCHARG
計算の最後に CHGCAR ファイルに電荷密度の情報を出力するか指定します。

LPARD
バンドまたは k 点で分解した部分電荷密度を評価するか指定します。

IBAND
部分電荷の評価に使用するバンドを指定します。

EINT
部分電荷の評価時のエネルギー間隔を指定します。

LORBIT
射影の方法と PROCAR または PROOUT ファイルに出力するか指定します。

LORBMOM
軌道モーメントを出力するか出力するか指定します。

LVTOT
全ポテンシャルを LOCPOT ファイルに出力するか指定します。

LVHAR
Vionic(r)+Vhartree を LOCPOT ファイルに出力するか指定します。

LELF
ELFCAR ファイルを出力するか指定します。

EMIN
出力する DOS のエネルギー範囲の下限を指定します。

EMAX
出力する DOS のエネルギー範囲の上限を指定します。

NEDOS
DOS を評価する際のグリッド数を指定します。

LEPSILON
DFPT 計算から誘電マトリックス、圧電テンソル、ボルン有効電荷を計算するか指定します。

MD タブ

MDALGO
MD 計算の時間発展アルゴリズムを指定します。

POTIM
MD 計算の時間刻みまたは構造最適化計算の更新ステップ幅を指定します。

TEBEG
初期設定温度を指定します。

TEEND
最終設定温度を指定します。

SMASS
温度制御の方法または熱浴の質量パラメータを指定します。

LANGEVIN_GAMMA
Lengivein 熱浴の摩擦パラメータを指定します。

LANGEVIN_GAMMA_L
Parrinello-Rahman 圧力浴の摩擦パラメータを指定します。

PMASS
Parrinello-Rahman 圧力浴の質量パラメータを指定します。

MLFF タブ

ML_LMLFF
機械学習力場を利用するか指定します。

ML_ISTART
機械学習力場の学習・推論の有無などを指定します。

ML_LEATOM
機械学習力場からエネルギーを出力するか否かを指定します。

ML_MB
機械学習力場における局所参照配置の最大数を指定します。

ML_CTIFOR
機械学習力場で得られた力のベイズエラー推定における閾値を指定します。

ML_IWEIGHT
機械学習力場を学習する際の力、エネルギー、圧力の重みづけの設定方法を指定します。

ML_WTIFOR
機械学習力場を学習する際の力の重みづけを指定します。

ML_WTSIF
機械学習力場を学習する際の圧力の重みづけを指定します。

ML_WTOTEN
機械学習力場を学習する際のエネルギーの重みづけを指定します。

Others タブ

Other settings for INCAR
INCAR ファイルに記載するその他のパラメータを入力します。

Preview タブ

INCAR
現在の設定で生成される INCAR ファイルのプレビューです。

Pseudopotential タブ

Pseudopotential
使用する擬ポテンシャルの種類を指定します。

Options タブ

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。

Restore Working Folder
継続ジョブが異常終了時など、作業フォルダを実行前の状態に戻す際にクリックします。

6.19.4 実行

VASP を実行します。ローカルジョブには対応していないので、ファイルモードでは **リモートジョブ投入** が立ち上がります。

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 `test.poscar` のときのファイル/フォルダ名を併記しています。

種類	説明
sh ファイル `test.sh`	VASP を実行するためのシェルスクリプトファイルです。ジョブに依存する設定は含まれていません。
conf.sh ファイル `test_conf.sh`	上記の VASP を実行するためのシェルスクリプトが読み込む設定ファイルです。ジョブに依存する設定がまとめられています。
outcar ファイル `test.outcar`	ログファイルです。作業フォルダ内の OUTCAR のコピーです。
作業フォルダ `test_vasp_data\`	作業フォルダです。

作業フォルダ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
`INCAR`	計算条件を指定するファイルです。
`KPOINTS.ori`	K 点の設定ファイルです。
`OUTCAR`	ログファイルです。

ヒント：作業フォルダ

- 作業フォルダとは、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、作業フォルダの名前は `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フォルダ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フォルダ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、作業フォルダが `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。**

ジョブは *Winmostar Job Manager* を通じて実行されます。

6.19.5 ログを表示 (OUTCAR)

ログファイルをテキストエディタで開きます。

6.19.6 アニメーション (OSZICAR)

OSZICAR ファイルの情報から構造最適化、分子動力学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 **アニメーション操作エリア** を参照してください。アニメーション操作エリアから動径分布関数、自己拡散係数、平均二乗変位、各原子の変位などを計算できます。

6.19.7 エネルギー変化

SCF エネルギー変化 (XDATCAR)

ログファイルを選択し、SCF 計算中のエネルギー変化の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。

6.20 ツールメニュー

6.20.1 環境設定

環境設定ウィンドウを開きます。詳細は **ツール → 環境設定 メニュー** を参照してください。

6.20.2 フラグメントを登録/削除

フラグメントを登録

フラグメントを登録 と同じです。

フラグメントを削除

フラグメントを削除 と同じです。

6.20.3 構造式を入力

構造式 と同じです。

6.20.4 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。 *Options* には Balloon のオプションを入力します。`*_balloon_tmp` という作業フォルダに中間ファイルが生成されます。

本機能は以下のように動作しています。

1. 初期構造に対し、GA を使わず配座探索

   Ballon オプション: -v 1 -c 10 --noGA -i 300 --randomSeed 51277

2. 1 の最もエネルギーが低い構造に対し、GA を使い配座探索

   Ballon オプション: -v 1 -b -k -c 400 --full -R 0.25 --nGene 20 --random 51277

3. 2 のエネルギーが低い構造から 4 個に対し、GA を使わず配座探索

   Ballon オプション: -v 1 -c 25 --noGA -i 300 --randomSeed 51277

4. 3 のエネルギーが低い構造から 100 個を抽出

5. *Cluster similar structures* にチェックが入っていた場合は、100 個の構造をクラスタリングし、RMSD tolerance 以下の類似構造を集約して Select conformation ウィンドウに表示（ただし、簡易的なクラスタリングのため、候補が効率よく削減できない場合があります）

6. メインウィンドウに反映したい構造にチェックを入れて OK をクリック

Select Conformation ウィンドウで複数構造にチェックを入れた場合はメインウィンドウにアニメーションとして読み込まれます。構造スキャン計算機能を併用すると、複数の配座に対して一括して計算を実行し結果を取得することができます。

> **警告:** 本機能は、結合次数に影響を受けます。

6.20.5 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の間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ます。

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。

6.20.6 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 とも呼ばれる）

分子体積は各原子を中心とする vdw 半径の球の内部の集合の体積を指します。

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 π (3V/4 π)**(2/3) 最小表面積 = 4 π (3V/4 π)**(2/3) (分子体積が等しい真球の表面積)

6.20.7 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、各原子を中心とする vdw 半径の球全てを内包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。

6.20.8 慣性半径

分子の慣性半径を計算します。計算された慣性半径の値はバックグラウンドでファイルに保存されます。保存される際の名前は **ツール → 環境設定 メニュー** で切り替えることができます。

6.20.9 双極子モーメント

表示されている分子構造に点電荷の情報が存在するときに、その点電荷から計算される双極子モーメントを計算し表示します。複数種類の電荷を持つ場合は、それぞれの電荷の種類に対して計算され表示されます。

6.20.10 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。

6.20.11 環構造の単位法線ベクトル

NICS 計算などにおいて必要な、環構造の単位法線ベクトルを表示します。対象となる環構造をグループ選択した上で本機能を呼び出してください。

例えばベンゼン環の場合は、ベンゼン環を構成する炭素 6 つをグループ選択します。

出力されるベクトルは以下のように計算されます。

1. グループされた原子のうち、共有結合する 2 原子のリストを作成します。
2. 1 で作成されたリストの各 2 原子について、その 2 原子とグループ選択の幾何中心の 3 点で張られる平面に垂直なベクトルを算出します。
3. 2 で算出したベクトルの平均を本機能で最終的に表示します。

6.20.12 マークされた原子間のベクトル

メインウィンドウでマーク（左クリック）した 2 原子の間のベクトルおよび単位ベクトルの値を表示します。

6.20.13 ボロノイ多面体体積

各原子のボロノイ多面体体積をリストで表示します。

6.20.14 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。

6.20.15 リモートジョブ投入

ファイルモードにおいて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 Remote Job* **ウィンドウの各機能** を参照してください。

6.20.16 リモートサーバ

プロジェクトモードにおいて各プロファイルのリモートサーバの操作を行います。

設定

プロファイルの設定を行います。

6.20.17 Cygwin

CygwinWM の端末画面（ターミナル）を起動します。

6.20.18 ログビューワ

リアルタイムに更新されるテキストファイル（ソルバのログファイルなど）の末尾をリアルタイムに表示します。ウィンドウにテキストファイルをドラッグアンドドロップしてください。

6.20.19 単位を変換

原子・分子系に特化した単位の変換ツールを開きます。

6.20.20 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。

6.20.21 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。複数の分子構造の類似性の確認に便利です。

1. *Import from Main Window* または *Import from File* ボタンで表示したい分子構造を読み込み *Structures* のリストに追加します。ドラッグ&ドロップでエクスプローラーから直接読み込ませることもできます。
2. *Structures* のリストで強調表示したいファイル名をクリック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、 *Reset* ボタンで全ての分子を削除します。
4. *Rotate to align 3 atoms* 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、*Offset* の *X* , *Y* , *Z* の値を調整して重ね合わせる面をずらします。
6. *Structures* のリストに 2 分子しかない場合は *RMS-Fit All* ボタンで、2 分子間の RMS（座標の二乗平均平方根）が最小になるように自動で分子を回転します。また、 *RMS* に 2 分子間の RMS が表示されます。
7. *Open Viewer* ボタンを押すと、*Winmostar Viewer* で表示することができます。

6.20.22 複数ファイルを SDF 形式に集約

複数のファイルを 1 つの SDF 形式のファイルに集約して保存します。選択されたフォルダの中に含まれる全てのファイルについて集約します。**ファイルを開く** で開くことができるファイルの以外は読み込まれません。(拡張子で判断されます)

6.20.23 アニメーション

アニメーションに切り替え

アニメーションを表示していない状態でこの機能を使うと、1 フレームのアニメーションが表示されている状態に切り替わります。

アニメーションを破棄

アニメーションが表示されている状態でこの機能を使うと、現在のフレームのみが残されアニメーションが表示されていない状態に切り替わります。

フレームを追加

アニメーションに対し、現在のフレームを複製し新しいフレームを追加します。

現在のフレームを削除

アニメーションに対し、現在のフレームを削除します。

各分子を異なるフレームに分離

各分子を異なるフレームに分離します。counterpoise 計算などにおいて使うと便利です。

6.20.24 構造スキャン

少しずつ座標・セルサイズを変えた構造を生成し、アニメーションを作成します。

Transform cell only along the selected axis
Axis で選択した軸の方向にセルを伸長または圧縮します。 *Variable* が Length change の時は値として増分の長さ(単位はオングストローム)、Normal strain の時は値としてひずみを指定します。いずれも 0 の時は元のセルサイズと同じであることを意味します。軸が x, y, z の場合は Normal strain のみ選択できます。 *Change Atomic Position with keeping fractional coordinates* にチェックが付いている場合は各原子の座標が分率座標を固定しながら変化し、チェックが付いていない場合は各座標の座標が変化しません。

Transform cell by shear strain
セルにせん断ひずみを与えます。

Generate all strain modes
セルにすべての垂直ひずみ (x, y, z)、せん断ひずみ (yz, zx, xy) を与えます。ここで生成した構造に対し Quantum ESPRESSO で構造スキャン計算を実行した後、 **弾性定数テンソル** を用い

ると弾性定数テンソルを取得することができます。この機能を利用する前にセルも含めた構造最適化計算を実行しておく必要があります。

Transform cell similarly
セルを相似的に変形させます。値として各軸のひずみを指定します（例えば値が 0.1 の場合は体積が $(1+0.1)^3 = 1.331$ 倍、値が-0.1 の時は体積が $(1-0.1)^3 = 0.729$ 倍になります）。各原子の座標は分率座標を固定しながら変化します。体積ひずみを算出したい時に使います。

Translate group along selected axis/vector
選択グループの座標を *Axis* で選んだ軸の方向に並進移動させます。値として並進移動する距離（単位はオングストローム）を指定します。Apply scale factor にチェックを入れた場合は、ステップが進むにつれ間隔を長く（scale factor が 1 より大きい場合）、または短く（scale factor が 1 より小さい場合）設定します。

Change dihedral of marked atoms
あらかじめメインウィンドウでクリックした 4 つの原子で定義される二面角を変更します。

Min
値の最小値を指定します。

Max
値の最大値が表示されます。 *Max* は *Min* と *Interval* と *# of steps* から自動的に設定されるので直接指定することはできません。

Interval
値の間隔を指定します。

# of steps
値の数を指定します。

Show Preview
設定した内容でのアニメーションのプレビューを確認できます。

OK
アニメーションを生成します。

6.21 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フォルダの 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。

Xyz ファイルの保存に旧式 (V9 以前) のフォーマットを使用
xyz ファイル形式で保存する場合に、V9 以前でデフォルトとしていたヘッダのない xyz ファイルとして保存します。

Xyz ファイルの保存にセル形状を出力
xyz ファイル形式で保存する場合に、セル形状を出力します。

ChemDraw の MOL 形式を読み込み後結合長と水素を自動調整
ChemDraw の MOL 形式を読み込み後結合長と水素を自動調整します。

Xyz ファイルの保存に残基番号を出力
xyz ファイル形式で保存する場合に、各行の最後に残基番号を出力します。

ファイルを開くときにプロジェクト表示エリアを維持
ファイルモードに切り替わるときにプロジェクト表示エリアを自動で隠すか維持するか指定します。

最近使用したファイル/プロジェクトの数
最近使用したファイル/プロジェクトの数を指定します。

Cube ファイルの表示に外部ビューワを使用
Cube ファイルを開く際に、Winmostar Viewer ではなく外部ビューワ（VESTA など）を使用します。プログラムパスの Cube Viewer で選択したプログラムが使用されます。

CIF ファイル解析方法
CIF ファイル読み込みに使うライブラリを指定します。Gemmi は V11.6.0 から実装された方法です。pymatgen は V11.5.X 以前で使われていた方法です。

[ツール]-[慣性半径] において旧式のファイル名を使用
[ツール]-[慣性半径] で出力するファイルの名前を V11.6.0 以前の形式または V11.6.1 以降の形式の間で切り替えます。

GIF animation の生成に ImageMagick を使用
チェックが入った場合には GIF アニメーションの生成に Cygwin 上の ImageMagick を使用します。チェックが入っていない場合は FFmpeg を使用します。

CAR ファイルの出力時に可変フォーマットを使用
チェックが入った場合は可変フォーマット、入っていない場合は固定フォーマットで CAR ファイルを生成します。原子数が多いときに msi2lmp などのツールを使う際に便利です。

MOL/SDF 形式出力時に CHG レコードを追加
MOL/SDF 形式のファイルを出力する際に、電荷情報を CHG レコードとして出力します。

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。

簡易構造最適化の方法
簡易構造最適化 で利用する方法を選択します。

力場、カットオフ、閾値（OpenBabel）
簡易構造最適化の方法が OpenBabel の時のパラメータを指定します。

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。

アニメーションで座標表示エリアを更新する最大原子数
アニメーションの再生時に座標表示エリアを都度更新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。

結合を自動生成する最大原子数
結合を自動生成する処理が動作する最大原子数を設定します。

フラグメント選択のショートカットを表示
ツールバーにフラグメント選択のショートカットボタンを設置します。（V10 以前の同様）

ツールバーのキャプションを表示
ツールバーの「ソルバ」「元素」「フラグメント」などのキャプションを表示します。

分子表示エリアで右クリックした際に

コンテキストメニューを表示
分子表示エリアで右クリックした際にコンテキストメニューを表示します。

フラグメントで置換
分子表示エリアで右クリックした際にフラグメントで置換します。（V10 以前と同様）

フラグメントをアルファベット順にソート
フラグメントのリストをアルファベット順にソートします。（V10 以前と同様）

計算タブ

General

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 からも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。

最大ジョブ数
ジョブマネージャの最大ジョブ数を設定します。

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。

リモートサーバ上のディレクトリ名に"wm_"を付ける
チェックした場合はリモートジョブ実行の作業フォルダにユーザ名に"wm_"をつけたディレクトリ名を使用します。

QM

GAMESS 計算後に強制的にスリープ
チェックが入っている場合は、ローカルマシンで GAMESS を実行した後に強制的に指定秒数スリープします。計算直後にログの内容をその場で確認したいときに便利な機能です。

GAMESS ローカルジョブ実行中にログを表示
GAMESS のローカルジョブを実行する際に、ログをリアルタイムで表示するか否かを選択します。軌道係数の表示などが重い際に有用です。

mpiexec (NWChem)
NWChem のローカルジョブで並列計算時に使う mpiexec を指定します。 *MPICH* の場合は **プログラムパス** で MPICH2 に指定された mpiexec を利用します。 *Select* の場合は任意の mpiexec を指定できます。

Options for mpiexec (NWChem)
mpiexec (NWChem) で *Select* を選択した場合の mpiexec コマンドの引数を入力します。`%WM_NUM_PROC%` と入力した箇所には実行時に自動的に並列数が代入されます。（例：*Options for mpiexec (NWChem)* に `-np %WM_NUM_PROC%` と入力し 2 並列で計算する場合、実際には `-np 2` という引数で mpiexec が実行されます。）

GAMESS による RESP 電荷自動計算時の並列数
GAMESS を使って RESP 電荷を自動算出する際の並列数を指定します。

RESP 電荷自動計算時のキーワード (GAMESS)
GAMESS を使って RESP 電荷を自動算出する際のキーワードを設定します。デフォルトでは HF/6-31G*による 1 点計算を実行するキーワードが使われます。

MD

AmberTools で計算する電荷を自動調整
acpype または AmberTools を利用して AM1/BCC、Gasteiger、RESP 電荷を算出する際に、分子全体の電荷を厳密に整数値にします。この場合、分子内の最初の原子の電荷の値が微修正されます。

力場割り当て時に残基名と原子名を保持
力場割り当て時に、残基名と原子名を保持するか設定します。

top ファイル生成時に大文字・小文字を区別
内部的に力場パラメータを書き込む top ファイルを生成する際に、原子名・原子タイプ名の一致を検出する部分で大文字・小文字を区別するか指定します。Gromacs に限らず力場パラメータを使う全ての処理において影響します。

mpiexec (LAMMPS)
LAMMPS のローカルジョブで並列計算時に使う mpiexec を指定します。 *MPICH* の場合は **プログラムパス** で MPICH2 に指定された mpiexec を利用します。 *Select* の場合は任意の mpiexec を指定できます。

Options for mpiexec (LAMMPS)
mpiexec (LAMMPS) で *Select* を選択した場合の mpiexec コマンドの引数を入力します。**%WM_NUM_PROC%** と入力した箇所には実行時に自動的に並列数が代入されます。（例：*Options for mpiexec (LAMMPS)* に **-np %WM_NUM_PROC%** と入力し 2 並列で計算する場合、実際には **-np 2** という引数で mpiexec が実行されます。）

MD の結果解析で倍精度を使用
Gromacs を使用する結果解析において gmx（単精度）または gmx_d（倍精度）を使用するか設定します。

top ファイル読み込み時に元素を更新
Gromacs の力場割り当てにおいて top ファイルを読み込むときに、元素を top ファイルから読み込んでモデルに反映するか設定します。

使用する LAMMPS のバージョン
出力する LAMMPS の入力ファイルが対応する LAMMPS のバージョンを指定します。いくつかのキーワード（thermo_style など）の出力形式はバージョンによって変化します。

使用する Gromacs のバージョン
出力する Gromacs の入力ファイルが対応する Gromacs のバージョンを指定します。いくつかのキーワード（tau_p など）の出力形式はバージョンによって変化します。

LAMMPS ポテンシャルフォルダ
LAMMPS のポテンシャルフォルダについて設定します。

Open potential directory
LAMMPS のポテンシャルフォルダをエクスプローラで開きます。

LAMMPS の data ファイル内で同一パラメータの type を統合
出力する LAMMPS の data ファイルにおいて、同一パラメータの Bond type, Angle type, Dihedral type, Improper type を統合するか設定します。

LAMMPS の pair_style, Potential file の入力を許可
力場割り当て機能において、pair_style と Potential file をユーザが自由に入力できるようにします。

LAMMPS の data ファイルで PairIJ の形式を使用
data ファイルを生成する際に、LJ パラメータを Pair Coeffs の形式ではなく PairIJ Coeffs の形式で出力します。異種間パラメータを調整したいときに有用です。

Solid

Spglib の許容誤差
Spglib で結晶の対称性を自動検出するさいの許容誤差を設定します。

Spglib 実行前に警告を表示する最低原子数
Spglib の実行をスキップする最低原子数を設定します。

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。

Open k-path file
Quantum ESPRESSO および OpenMX でバンド構造を算出する際のデフォルトの k 点パスを設定するファイルを開きます。Quantum ESPRESSO の ibrav ごとに設定します。

mpiexec (QE)
Quantum ESPRESSO のローカルジョブで並列計算時に使う mpiexec を指定します。

MPICH の場合は **プログラムパス** で MPICH2 に指定された mpiexec を利用します。*Select* の場合は任意の mpiexec を指定できます。

Options for mpiexec (QE)
mpiexec (QE) で *Select* を選択した場合の mpiexec コマンドの引数を入力します。**%WM_NUM_PROC%** と入力した箇所には実行時に自動的に並列数が代入されます。（例：*Options for mpiexec (QE)* に **-np %WM_NUM_PROC%** と入力し 2 並列で計算する場合、実際には **-np 2** という引数で mpiexec が実行されます。）

使用する QE のバージョン
出力する QE の入力ファイルが対応する QE のバージョンを指定します。いくつかのキーワード（&fcp, HUBBARD など）の出力形式はバージョンによって変化します。

QE 擬ポテンシャルフォルダ
Quantum ESPRESSO の擬ポテンシャルフォルダについて設定します。

Open QE pseudo directory
Quantum ESPRESSO の擬ポテンシャルフォルダをエクスプローラで開きます。

Download pseudo files
Quantum ESPRESSO の擬ポテンシャルフォルダに Web サーバから自動で擬ポテンシャルファイルをダウンロードします。

Open priority list
Quantum ESPRESSO キーワード設定ウィンドウにおける Pseudo potential の選択肢のリストの並び順を設定します。アスタリスクはワイルドカードとして使用できます。

QE MOL ファイル用フォルダ
RISM 対応版 Quantum ESPRESSO の溶媒ファイルを入れるフォルダを指定します。

スラブを作成で pymatgen を使用する
旧仕様のスラブを作成機能で pymatgen を使用するか指定します。使用しない場合は内製のルーチンを使用します。

新しいスラブ作成機能を使用する
チェックが入っている場合は新仕様、入っていない場合は旧仕様のスラブを作成機能が使われます。

表示タブ

標準色
配色を、Winmostar、GaussView、Jmol、Rasmol、旧 Winmostar 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。

補助結合
補助結合の色を変更します。

背景
背景の色を変更します。

背景 (Viewer)
Winmostar Viewer の背景の色を変更します。

文字
分子表示エリアにおける文字の色を変更します。

電荷
分子表示エリアにおける電荷の球表示の色を変更します。

結合を原子の色で着色
結合を原子の色で着色します。

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。

結合の太さ
結合の太さを指定します。

補助結合を破線で表示
チェックが入っていた場合は補助結合を破線で表示し、チェックが入っていない場合は実線で表示します。破線の長さを **長さ** で指定します。水素結合などの表示で有用です。

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。

ズーム中にワイヤーモデルに変更する最小原子数
ズーム中にワイヤーモデルに変更する最小原子数を設定します。

ズーム後ワイヤーモデルから復帰する時間
ズーム後ワイヤーモデルから復帰する時間をミリ秒で設定します。

奥行き表現
奥行き表現を使用するか設定します。

奥行き表現の強さ
奥行き表現に使用するフォグの濃さを調整します。

奥行き表現を有効にする最小原子数
設定した原子数以上の場合に奥行き表現を有効にします。

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。

ヒント表示の待ち時間
マウスカーソルを各種コントロールに重ねた際に表示されるヒントの表示の待ち時間をミリ秒で設定します。

ヒントのフォントサイズ
マウスカーソルを各種コントロールに重ねた際に表示されるヒントのフォントサイズを設定します。

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** からも設定することができます。

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** からも設定することができます。

プログラムパスタブ

各種プログラムのインストールパスを指定します。

MOPAC、GAMESS についてはプログラムパスを複数指定できます。プロジェクトモードでは (1) のみが使用されます。ファイルモードでは *QM → MOPAC* および *QM → GAMESS* 以下に複数設置された実行メニューでそれぞれを利用することができます。ファイルモードのキーワード設定ウィンドウの *Run* ボタンで起動するプログラムは (1) に設定されたプログラムパスです。

Quantum ESPRESSO については、複数ある実行ファイルのうち `pw.exe` を選択します。

%APPDIR%は Winmostar のインストールフォルダ、%CYGWINDIR%は CygwinWM のインストールフォルダを示すエイリアス文字です。

6.22 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。

6.23 ヘルプメニュー

6.23.1 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。

6.23.2 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。

6.23.3 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。

6.23.4 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。

6.23.5 インストールテスト

テストしたい項目にチェックを入れてから *Start* ボタンをクリックすると、各種ソルバの動作テストが実行されます。テストに成功したら `All tests passed.` 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、CygwinWM や各種ソルバをインストールする際に、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。

6.23.6 CygwinWM を診断

Check Now ボタンをクリックすると、*CygwinWM* 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、CygwinWM をインストールする際に、CygwinWM 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。

6.23.7 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。

6.23.8 デバッグモード

デバッグモードに切り替えます。

6.23.9 ジョブマネージャをリセット

Winmostar Job Manager の状態をリセットします。

6.24 アニメーション操作エリア

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）データについて本機能から直接結果解析することも可能で、詳細は *Options* → *Tools* を確認してください。

Reload
アニメーションのファイルを再度読み込みます。

Options

Export

Current Frame
現在のフレームを別名で保存します。

All Frames Separately
全てのフレームをそれぞれ個別のファイルに出力します。

例えば、SDF ファイルの各分子構造を個々のファイルに分割し保存・編集したいときに便利です。分割したファイルを再び SDF ファイルに集約する場合は **複数ファイルを *SDF* 形式に集約** を使います。

POSCAR 形式で出力する際には、VASP の NEB 機能向けに各ファイルをフォルダに分けて出力することもできます。

GIF Animation
GIF アニメーションファイルを書き出します。

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。

XYZ File (Multiframe)
全てのフレームを含む xyz ファイルを書き出します。

MOL2 File (Multiframe)
全てのフレームを含む mol2 ファイルを書き出します。

SDF File (Multiframe)
全てのフレームを含む SDF ファイルを書き出します。

WMM File (Multiframe)
全てのフレームを含む WMM ファイルを書き出します。

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。

CSV (Values)
リストの表示されている数字を csv 形式で出力します。

Tools

Invert Trajectory
トラジェクトリを反転させます。順方向、逆方向の IRC 計算のトラジェクトリを、鞍点を中心に結合させたいときに便利な機能です。

Skip Frames
トラジェクトリを一定間隔で間引きます。長大なトラジェクトリのサイズを小さくして解析の処理速度を軽くしたい場合などに便利な機能です。

Trim Frames
トラジェクトリのうち指定した範囲以外を削除します。

Delete Intermediate Frames
トラジェクトリのうち最初と最後以外のフレームを削除します。NEB 法で便利な機能です。

Translate All Atoms
全てのフレームの全ての原子を並進移動させます。計算済みのデータを可視化する際、原子位置を微調整したい時に便利な機能です。

Set Origin as Lower Bound Edge of Cell
各フレームのシミュレーションセルの各方向の始点を、原点に設定します。 *Translate All Atoms* 機能と組み合わせて使用すると便利な機能です。

Append Trajectory
現在のアニメーションに他のファイルのアニメーションを繋げます。順方向、逆方向の IRC 計算のトラジェクトリを、鞍点を中心に結合させたいときに便利な機能です。

Interpolate between Selected Frames
選択した 2 つのフレームの構造を補間するフレームを追加します。線形補間と IDPP 法のどちらかを選ぶことができます。選択した 2 つのフレームが隣接していない場合は、その間のフレームが削除されたうえで補間されたフレームが追加されます。NEB 法で便利な機能です。

Reorder for Reaction Simulation
選択した 2 つのフレームにおいて、最も近い原子が同じ番号となるように番号を並べ替えます。NEB 法で便利な機能です。

Mean Square Displacement/Diffusion Constant
平均二乗変位および自己拡散係数を算出します。詳細は **自己拡散係数/平均二乗変位** を参照してください。Gromacs など一部のソルバでは本メニューが有効になりませんが、ソルバのメニューに同等機能が用意されている場合があります。一部のソルバでは、アニメーションの各フレームが何ステップおきに出力されているかと、シミュレーションの 1 ステップあたりの時間（時間刻み、delt t）を聞かれるので、入力してください。入力した値に自信がない場合は、表示される平均二乗変位の横軸の最大値を確認し、それがシミュレーション時間に一致していれば問題ありません。

Radial Distribution Function
動径分布関数を算出します。詳細は **動径分布関数** を参照してください。Gromacs など一部のソルバでは本メニューが有効になりませんが、ソルバのメニューに同等機能が用意されている場合があります。

Displacement of Selected Atoms
選択グループの原子の変位をプロットします。

Rotational Autocorrelation Function
2 原子間で定義されるベクトルの 2 次の Legendre 多項式 P2 を用いた回転相関関数を算出します。Definition が Atom Pair Vectors の場合は、Target Group の 1 番目の原子と 2 番目の原子の間で 1 番目のベクトルを定義、3 番目の原子と 4 番目の原子の間で 2 番目のベクトルを定義... という形で解析対象が決まります。Plane Normals の場合は、Target Group の 1, 2, 3 番目の原子が作る面の法線で 1 番目のベクトルを定義、4, 5, 6 番目の原子が作る面の法線で 2 番目のベクトルを定義... という形で解析対象が決まります。Molecular Dipole Vectors の場合は、Target Group に含まれる各分子の双極子モーメントが解析対象となります。各ベクトルの回転相関関数の平均がプロットされます。

Intramolecular Vector Autocorrelation Function
2 原子間で定義されるベクトルの自己相関関数を算出します。解析対象とするグループの 1 番目の原子と 2 番目の原子の間で 1 番目のベクトルを定義、3 番目の原子と 4 番目の原子の間で 2 番目のベクトルを定義... という形で解析対象が決まります。各ベクトルの自己相関関数の平均がプロットされます。ポリマーの末端間ベクトル (end-to-end vector) 自己相関関数の取得に使用できます。

Draw Path
選択グループ内の各原子の軌跡を分子表示エリア内に線で表示します。

Change in Number of Molecules for Each Molecular Species
各分子種の分子数変化をプロットします。

Detect Broken Bonds
全ての結合について、最初のフレームにおける結合長から指定距離離れた際のフレーム番号とその結合の番号をリストアップします。1 つの結合につき、最初に離れたフレームのみが表示されます。第一原理 MD、反応性力場、機械学習力場での計算に便利です。

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ラジェクトリファイルを作成します。

Auto
File → Export All Frames Separately などのファイル出力機能の実行時に、各フレームの構造に対し操作を行います。操作はメニューの順に実行されます。

Check All/Uncheck All
Deleting Hydrogen から *Quick Optimization* までの全ての項目のチェックします/チェックを外します。

Deleting Hydrogen
各フレームの構造に対し、水素原子を削除します。 **すべての水素を削除** と同じ操作が実行されます。

Extracting One Molecule
各フレームの構造に対し、1 分子だけ構造を残します。

Adjusting Coordinate
各フレームの構造に対し、結合長を自動で調整します。 **結合長を自動調整** と同じ操作が実行されます。

Adding Hydrogen
各フレームの構造に対し、水素を自動で付加します。 **すべての原子に付加** と同じ操作が実行されます。

Quick Optimization
各フレームの構造に対し、簡易構造最適化を実行します。 **簡易構造最適化** と同じ操作が実行されます。

Running MOPAC
各フレームの構造に対し、MOPAC を実行します。

Enable Dynamic Bond
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。

Speed
再生速度を調整します。

Loop
チェックされている場合はループ再生されます。

Open Viewer
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。

Frame
表示位置を操作、調整します。

Plot Column
リストの中で、このウィンドウ下部のグラフ表示部に表示する列を指定します。直接値を入力することも可能です。

Custom Plot
リストの内容、原子間距離、角度、格子定数、電荷などを柔軟にプロットできるウィンドウを開きます。

6.25 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。

6.26 Surface Setup・Cubegen 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 形式で出力します。

***File* → *Export VRML & Open VRML Viewer* メニュー**
VRML 形式で出力し、そのファイルを VRML ビューワで開きます。VRML ビューワは環境設定で設定できます。

***File* → *Open VRML Viewer* メニュー**
現在のファイルを VRML ビューワで表示します。

***File* → *Open Winmostar Viewer* メニュー**
現在のファイルを Winmostar Viewer 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。

- **MO**
  Selected MO で選択された分子軌道の 3 次元分布です。
- **Surface**
  VDW 半径程度の距離（厳密ではありません）に描画される分子表面です。
- **ESP(Population Charge)**
  ESP(Population Charge) は Population 解析後の点電荷から算出する静電ポテンシャルの 3 次元分布です。 *ESP* よりも高速に動作します。複数種類の電荷が存在する場合は（高優先）ESP 電荷＞ Lowdin 電荷＞ NBO 電荷＞ User 電荷＞ Mulliken 電荷（低優先）の順に使用されます。**表示** → **ラベル/電荷** メニューで電荷の種類が指定されている場合は、その電荷が優先して使用されます。

- **ESP(Population Charge)/Surface**
  ESP(Population Charge) の情報を、分子表面上で表示します。複数種類の電荷が存在する場合は ESP(Population Charge) と同様に振る舞います。
- **MO/Surface**
  MO の情報を、分子表面上で表示します。
- **Density**
  電子密度の 3 次元分布です。
- **ESP**
  電子状態計算で直接計算された静電ポテンシャルの 3 次元分布です。

ヒント: 以下の手順で、 *ESP/Surface* に相当する、分子表面上での ESP を表示できます。（ただし、MOPAC では未対応）

1. *Dump cube file* にチェックを入れ、 *Quantity* で *Density* を選択する。
2. *Draw* ボタンを押と、 `*_den.cube` というファイルが生成される。
3. *Quantity* で *ESP* を選択する。
4. *Draw* ボタンを押と、 `*_esp.cube` というファイルが生成される。この処理員は数分掛かることがある。
5. `*_den.cube` を Winmostar のメインウィンドウで開くと、 *Cube Plot* というウィンドウが開く。
6. *File 2* の横の ... ボタンをクリックし、 `*_esp.cube` を開く。
7. *Draw* ボタンをクリックする。

ヒント: Windows 版 Gaussian に同梱されている Cubegen プログラムをお持ちの場合は、 *ESP* の表示を高速化できます。Cube ファイルを開いた際に出現する *Cubegen* ウィンドウにおいて、*Use Gaussian's cubegen* チェックボックスにチェックを入れてください。

Cubegen ウィンドウのみ選択できる項目は次の通りです。

- **Spin**
  スピン密度 (アルファスピンとベータスピンの密度差) の 3 次元分布です。
- **Alpha**
  アルファスピン密度の 3 次元分布です。
- **Beta**
  ベータスピン密度の 3 次元分布です。
- **CurrentDensity=X**
  磁場により誘起された電流密度の 3 次元分布です。X は磁場をかける方向で、必要に応じて Y もしくは Z に書き換えて実行してください。
- **ShieldingDensity=XX1**
  磁気遮蔽密度の 3 次元分布です。=の後の 1 番目の X は磁場をかける方向、2 番目の X は誘起される場の方向、3 番目の数値は遮蔽密度を計算する原子の番号で、必要に応じて書き換えて実行してください。

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。

Specify Range
ESP(Population Charge)/Surface などの表示時に、カラーバーの範囲を手動で設定したい場合はチェックを入れます。

Min/Max
ESP(Population Charge)/Surface などの表示時に、カラーバーの範囲を指定します。

***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。

***Close* ボタン**
このウィンドウを閉じます。

6.27 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。

Options
ファイルの出力等を行います。

Export csv (Discrete) & Open Excel
離散的なスペクトルについて csv ファイルを出力して開きます。csv ファイルの内容は Export csv (Discrete) を参照してください。

Export csv (Discrete)
離散的なスペクトルについて csv ファイルを出力します。csv ファイルには、スペクトルの番号、波数、IR 強度、ラマン強度（存在する場合のみ）、平面偏光入射光の偏光解消率（存在する場合のみ）、非偏光入射光の偏光解消率（存在する場合のみ）、VCD 強度（存在する場合のみ）、スケーリングファクター適用後の波数が出力されます。

Export csv (Broadened) & Open Excel
ブロードニングされたスペクトルについて csv ファイルを出力して開きます。csv ファイルの内容は Export csv (Broadened) を参照してください。

Export csv (Broadened)
ブロードニングされたスペクトルについて csv ファイルを出力します。csv ファイルには、データの番号、端数、ブロードニングされた IR 強度、ブロードニングされたラマン強度（存在する場合のみ）、ブロードニングされた平面偏光入射光の偏光解消率（存在する場合のみ）、ブロードニングされた非偏光入射光の偏光解消率（存在する場合のみ）、ブロードニングされた VCD 強度（存在する場合のみ）、スケーリングファクター適用後の波数が出力されます。出力される点数は 1000 に固定されています。

Export 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。

Export Animation(mol2)
振動のアニメーションを mol2 形式で保存します。

Import Selected Frame from Animation
振動のアニメーションを特定フレームをメインウィンドウに読み込みます。

Close
このウィンドウを閉じます。

6.28 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。

Export csv (Discrete) & Open Excel
離散的なスペクトルについて csv ファイルを出力して開きます。

Export csv (Discrete)
離散的なスペクトルについて csv ファイルを出力します。

Export csv (Broadened) & Open Excel
ブロードニングされたスペクトルについて csv ファイルを出力して開きます。

Export csv (Broadened)
ブロードニングされたスペクトルについて csv ファイルを出力します。

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。

6.29 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。

Export csv & Open Excel
csv ファイルを出力して開きます。

Export csv
csv ファイルを出力します。

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。

6.30 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。

Uncheck All on Launch
チェックがついている場合は、本機能を立ち上げるたびに Energy Terms にチェックが入っていない状態になります。チェックがついていない場合は、Energy Terms のチェックがついている項目が保存されます。特定のソルバでのみ出現します。

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。

Plot Each Data Set on Separate Graphs
チェックがついている場合は、各項目を個別のグラフにプロットします。チェックがついていない場合は、1 枚のグラフに各項目が同時にプロットされます。

Calc Ave
各項目の平均値をテキストファイルで出力します。 *Calc Stdev and drift* にチェックが入っている場合は標準偏差とドリフト（時系列データを線形回帰して得られた直線の最小値、最大値の差）も出力します。

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。

Show Setting

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。

Export csv & Open Excel
csv ファイルを出力し Excel を開きます。

Export csv
csv ファイルを出力します。

Copy Columns
Excel にペーストできる形式で選択したデータをコピーします。

Export Gnuplot File
Gnuplot ファイルを出力します。

Calculate Average
表示されているデータの指定範囲での平均値を算出、表示します。

Add Cumulative Average
表示されているデータの積算平均のプロットを追加します。

Add Batch Average
表示されているデータのバッチ平均（移動平均）のプロットを追加します。グラフが円滑化されます。

Calculate Histogram
表示されているデータのヒストグラムを算出し表示します。

Calculate Differences from First/Last Value
表示されているデータについて、最初または最後の値からの差分を算出し表示します。

Calculate First Differences
表示されているデータの前方差分を算出し表示します。

Calcualte Integrated Values
表示されているデータの積分値を算出し表示します。

Calculate Average between Series
表示されている複数のデータ（シリーズ）間での平均を取ったデータを表示します。

Fit Curve
表示されているデータを関数にフィッティングします。Type では関数の種類を選択します。Equation と List of Parameters にはフィッティングする関数と係数が表示されます。Type が Custom の時は Equation と List of Parameters に関数と係数を入力します。Equation には Python の書式で記入でき、Numpy は np. で呼び出すことができます。List of Initial Parameter Values には係数の初期値をカンマ区切りで入力します。List of Parameter Value Ranges には係数の範囲をタプルで入力します（例えば係数が 3 つの時は「(引数 1 の下限, 引数 2 の下限, 引数 3 の下限),(引数 1 の上限, 引数 2 の上限, 引数 3 の上限)」と入力）。Specify Range にチェックを入れると、フィッティングする範囲を指定することができます。Specify 2nd Range にチェックを入れると、Specify Range で指定された範囲とは別の範囲でフィッティングが追加で行われます。Fitted Parameters にはフィッティング後の係数が表示されます。Fit をクリックするとフィッティングが実行されます。

Shift/Scale Data
表示されているデータを定数倍または定数分シフトします。x, y 軸どちらのデータを変更するか選べます。特定のデータ点の値で割るかシフトすることも可能です。

Change Range for Cyclic Variable
二面角などの周期的な変数に対し、その表示範囲を変更します。

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。

Export 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。

Export 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。

Export JPEG (Current frame)
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。

Export JPEG (Current frame,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。

Export JPEG (Sequence)
アニメーションを連番 JPEG ファイルとして保存します。

Export GIF (Animation)
アニメーションを GIF アニメーションとして保存します。

Export Contour Map (bmp)
表示されている等高線を bmp 形式で出力します。

Launch StereoPhoto Maker
StereoPhotomaker を起動します。

Exit
Winmsotar 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。

Debug
メモリ使用量など、デバッグ用の情報を表示します。

Use Legacy Representations Window
旧式の Representations ウィンドウを表示します。

About Winmostar Viewer
バージョンを表示します。

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 のウィンドウの左上にアニメーション操作用の 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。

Close
このパネルを閉じます。

6.32.4 Representations ウィンドウ

Mouse Mode
マウス操作の内容を指定します。

PBC
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。

Group
グループの定義を指定します。By Composition の時は分子量が一致する分子種でグルーピングします。ID はグループの ID を意味します。Style 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。Color は表示色を意味します。

Color
表示色を選択します。Property の場合は Winmostar から出力されたプロパティに応じて色付けされます。

Items
表示項目を選択します。

H
水素原子を表示します。

Dummy
ダミー原子を表示します。

Backbone
バックボーンのみを表示します。（タンパク質向け）

Cell
セルを表示します。（タンパク質向け）

Shape
表示形状を調整します。

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
分子軌道などの等値面の表示を調整します。

Style
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。

Color
等値面の色を調整します。

Trans
等値面の透明度を指定します。（0: 不透明、1: 透明）

Contour Map Position
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、面の表示方向を Direction, 面の表示位置を Pos で調整します。

Stereo/Enantiomer
立体視表示または鏡像体表示を調整します。

Arrow
矢印の表示を調整します。Color で色、Size でサイズを調整します。

Color bar
Color=Property の際に表示される色を変更します。カラーバーの上限値・下限値を変更する場合は、カラーバーの上下の値を直接編集します。

6.32.5 Representations ウィンドウ（旧式）

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
本ウィンドウ中部の *1* から *9* を各分子に割り当てます。

Composition
本ウィンドウ中部の *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）

Contour Map Position
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 Job Manager（JM）は Winmostar の補助プログラムとして動作し、各種ソルバのジョブのスケジューリングを行います。

MaxCores
ローカルマシンでジョブが実行される最大コア数です。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。

6.33.1 基本動作

Winmostar でファイルモードのローカルマシン上でのジョブ（**ローカルジョブ** と呼ぶ）またはプロジェクトモードのジョブを実行すると、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。ファイルモードの場合、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 x （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。

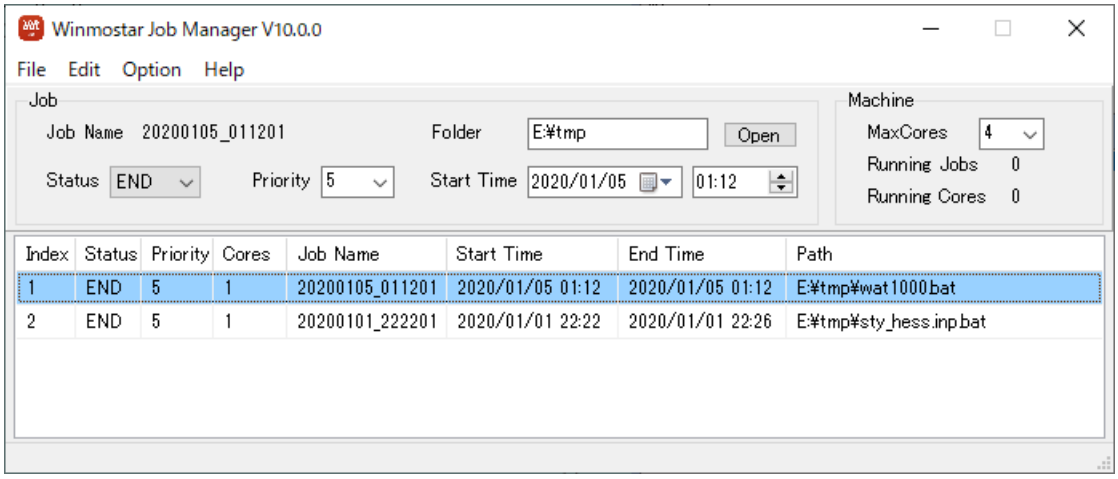
ヒント: Windows のタスクマネージャーを起動し、 **パフォーマンス** タブに移動すると、 **論理プロセッサ数** という欄に使用しているマシンのコア数が表示されます。

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処理が実行されます。リモートジョブの場合は、サブミットされるタイミングが *Priority* で変化し、リモートサーバ上での実行順番は qsub などのスケジューリングソフトウェアが実際に決定します。

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 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 対応するリモート環境

Winmostar は **推奨するリモートサーバ** に記載のジョブスケジューラに対応しています。

- Torque, OpenPBS, PBS Professional (PBS)
- Sun Grid Engine (SGE), Univa Grid Engine (UGE), Altair Grid Engine (AGE)
- Slurm Workload Manager (SLURM)
- FUJITSU Software Technical Computing Suite (PJM)
- IBM Platform Load Sharing Facility (LSF)

対応するジョブスケジューラがリモートサーバにインストールされていない場合は、以下の方法でリモートジョブを実行することができます。

1. *Queue* の設定で `Run` を選択する。
2. **`qsub`** , **`qstat`** などのコマンドを模倣するコマンド、スクリプトを用意し、必要に応じてそれらのコマンドの接頭辞を *Prefix for Queueing Commands* で指定する。

また、リモートサーバ上で基本的に bash シェルで動作することを想定しています。その他のシェルで動作させることも可能ですが、スクリプトの変更などに手間がかかる可能性があります。

7.2 ファイルモードにおけるリモートジョブの設定手順

プロジェクトモードにおけるリモートジョブ設定手順は **基本的な操作の流れ** を参照してください。

シミュレーションを実行する全体的な手順の流れは **基本的な操作の流れ** を参照してください。

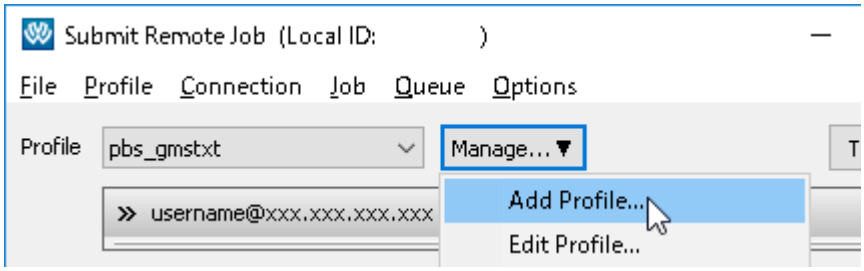
各機能の詳細は *Submit Remote Job* **ウィンドウの各機能** を参照してください。

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インストール・設定してください。この段階で、Winmostar を使わずサーバに SSH でログインし、ターミナル上でソルバを起動できる状態にする必要があります。

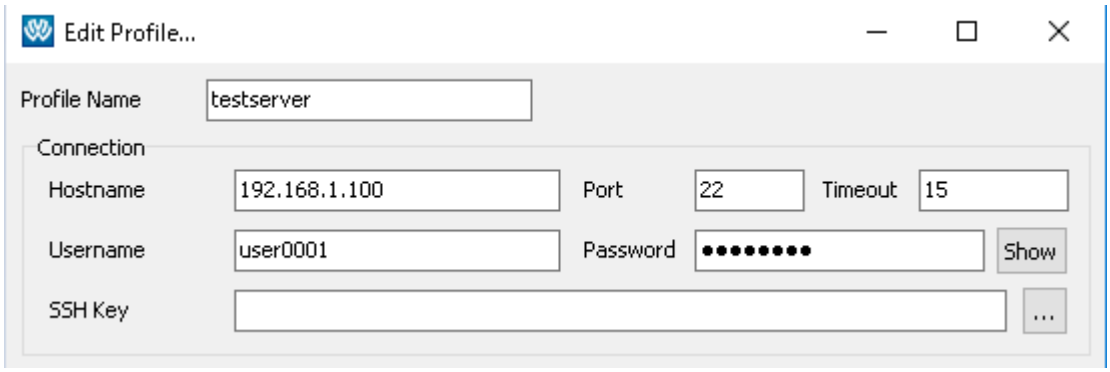
これからインストールする場合は、 **こちら** を参考にしてください。

ジョブのスケジューリングを使わずにジョブを実行する場合（多数のジョブを実行する際には推奨しません）、ジョブスケジューラのセットアップは不要で、後ほど *Queue* の設定において Run を選択してください。

2. 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。
3. *Submit Remote Job* ウィンドウにおいて、すでに設定が済んでいるプロファイルを使う場合は、 *Profile* で使うプロファイルを選択します。これから設定する場合は、 *Manage...* → *Add Profile* を選択します。



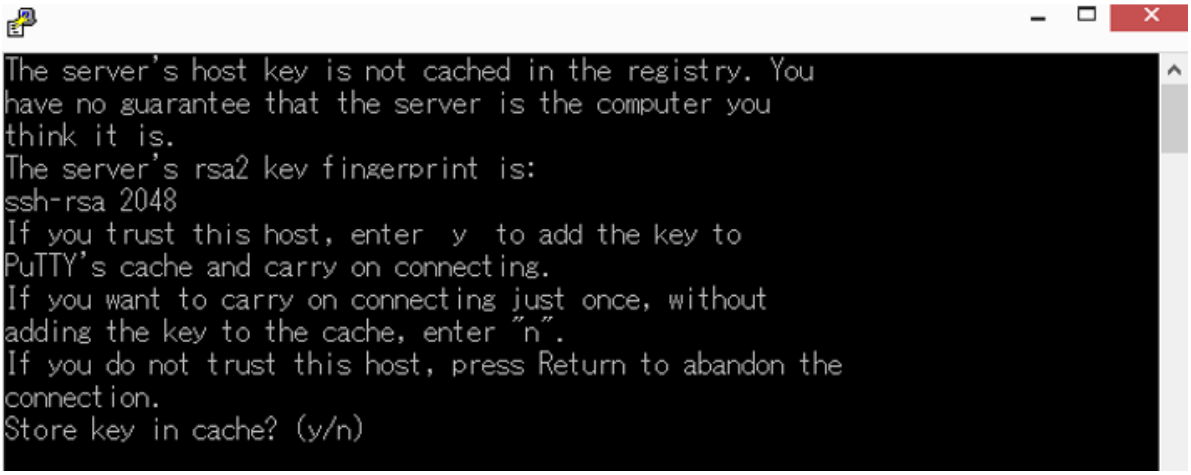
4. *Edit Profile* ウィンドウ上部にて、以下の内容を入力します。
   - Profile Name
   - Connection
     - Hostname
     - Port（通常は 22 を使用）
     - Timeout（わからない場合はデフォルト値を使用）
     - Username
     - Password（秘密鍵の時はパスフレーズを入力、それ以外の時はパスワードを入力）
     - SSH Private Key（秘密鍵を使う時のみ必要）



TSUBAME、FOCUS などに多段 SSH 接続する方法は リモートジョブの詳細設定 を参照してください。

5. 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。 ***SSH 接続のみ*** にチェックをいれ OK をクリックします。

   黒いターミナルウィンドウが開いて初回接続時は、 `Store key in cache? (y/n)` と表示される場合があります。その場合は、 `y` とキー入力します。



接続に成功した場合は、「テストが正常に終了しました」と表示されます。

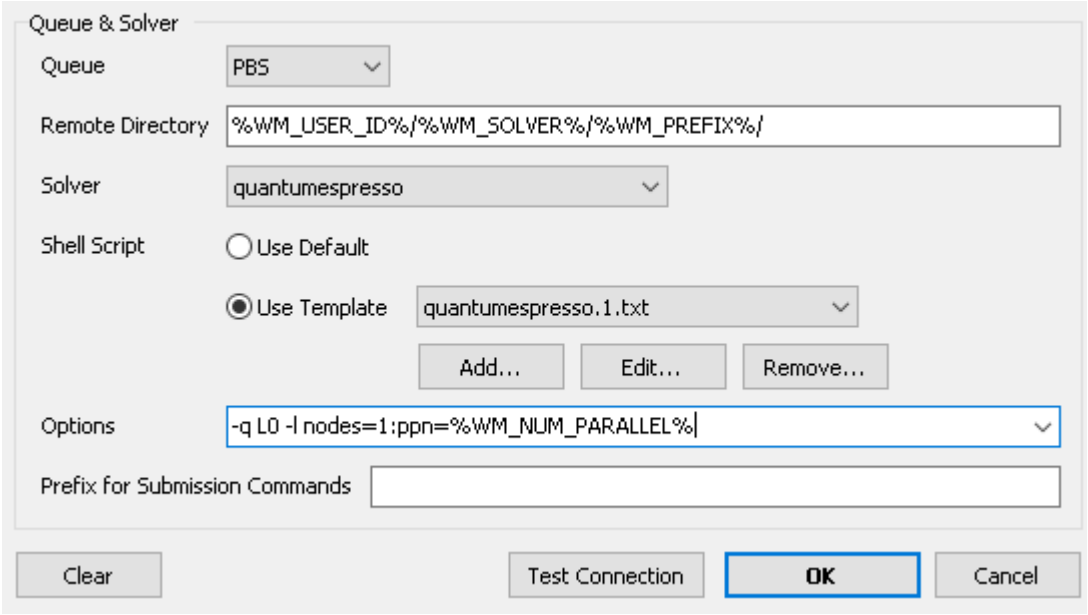
ユーザ設定等が間違っている場合は「テストが異常終了しました」と表示されるので 1 つ前の設定を見直してください。その場で正しいパスワードを入力した場合も、再度 *Edit Profile* ウィンドウでパスワードを再入力してください。

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。

秘密鍵を使う場合は、鍵形式が異なるために接続できない場合があります。詳しくは *SSH* **公開鍵・秘密鍵認証での接続方法** を参照してください。

入力内容に問題がないにも関わらず接続できない場合は、Winmostar 内部で SSH 接続に利用するライブラリ (libssh) のバージョンを切り替えることで接続できる場合があります。[ツール]-[環境設定]-[計算]-[SSH 接続に古いバージョンの libssh2(1.8.2) を使用する] のチェックを切り替えてください。

6. *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
     - 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* を選択します。次に、 *Options* に **qsub** や **sbatch** 等のジョブをサブミットするコマンドの引数を入力します。確保するリソースの情報はここで設定します。

利便性を上げるため、個々のジョブに依存する並列数やファイル名などは、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。

7. スケジューラの動作をテストする場合は、 *Edit Profile* ウィンドウ下の *Test Connection* ボタンをクリックします。リモートサーバのキューが埋まっていてすぐにジョブが流れない時は、キューが空くまで待つか次に進んでください。「SSH 接続とジョブスケジューラ」にチェックを入れます。「ジョブスケジューラの最大待ち時間を入力」も適宜設定し *OK* をクリックします。

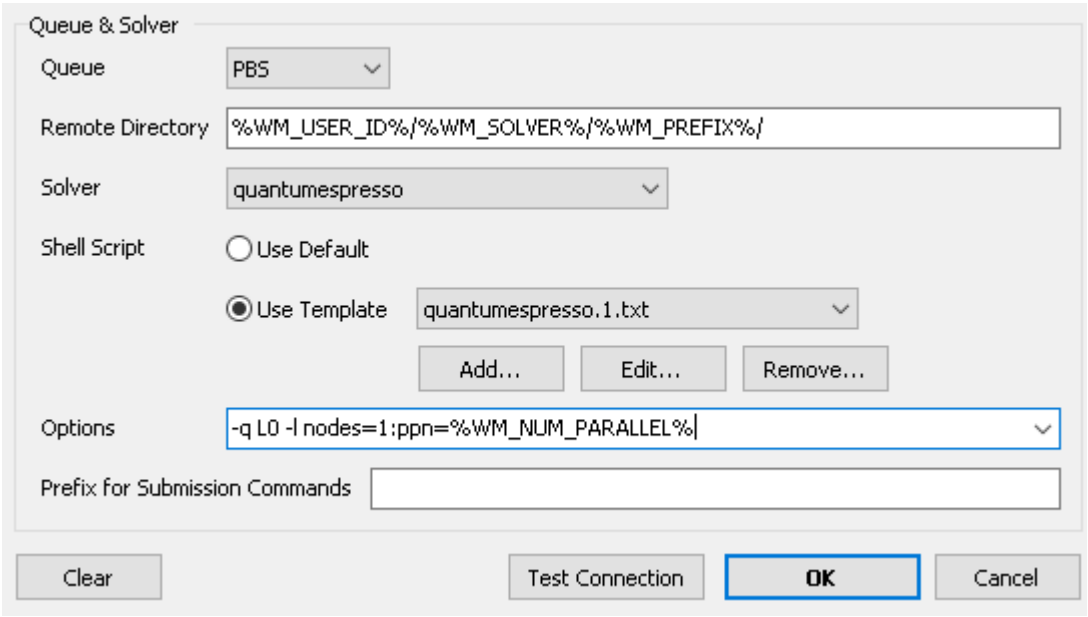
   接続に成功した場合は、「テストが正常に終了しました」と表示されます。

   設定が間違っている場合は「テストが異常終了しました」と表示されるので 1 つ前の設定を見直してください。Test Connection の詳細は *Test Connection* **機能** で確認できます。

   キューが埋まっている場合もテストが異常終了するため、その場合はキューが空くまで待ってください。

8. *Edit Profile* ウィンドウ下部にて、以下の内容を入力します。

   - Queue & Solver
     - Solver
     - Shell Script



まず使用するソルバを *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 テンプレートスクリプト （ジョブ実行に使われるシェルスクリプトのテンプレート）がない場合は、テンプレートスクリプトの名前を入力すると、テンプレートスクリプ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スクリプトを選択し、その下の *Edit...* ボタンをクリックするとテンプレートスクリプトがテキストエディタで開きます。

テンプレートスクリプトには、**`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。書き入れる場所は極力テンプレートスクリプト内の **`# Insert commands here`** から **`# Do not modify the followings`** の間にしてください。

利便性を上げるため、テンプレートスクリプトには、個々のジョブに依存する並列数やファイル名などを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。

9. ソルバの動作をテストする場合は、 *Edit Profile* ウィンドウ下の *Test Connection* ボタンをクリックします。リモートサーバのキューが埋まっていてすぐにジョブが流れない時は、キューが空くまで待つか次に進んでください。「SSH 接続とジョブスケジューラと (ソルバ名)」にチェックを入れます。「ジョブスケジューラの最大待ち時間」には適宜値を設定します。そして *OK* をクリックします。

   接続に成功した場合は、「テストが正常に終了しました」と表示されます。

   設定が間違っている場合は「テストが異常終了しました」と表示されるので 1 つ前の設定を見直してください。Test Connection の詳細は *Test Connection* **機能** で確認できます。

   キューが埋まっている場合もテストが異常終了するため、その場合はキューが空くまで待ってください。

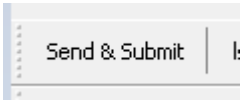
10. *OK* ボタンを押して *Edit Profile* ウィンドウを閉じます。

11. *Close* ボタンを押して *Submit Remote Job* ウィンドウを閉じます。「リモートサーバの設定を保存しますか？」と表示されたら **はい** をクリックします。

7.3 ファイルモードにおけるリモートジョブの操作手順

プロジェクトモードにおけるリモートジョブの操作手順は **基本的な操作の流れ** を参照してください。

- 各キューの使用状況を確認したい場合は *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ます。
- ファイルモードでジョブを開始したい場合は、 *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。

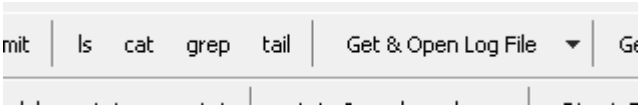
  リモートサーバでジョブが実行されたディレクトリは、*Profile* → *Edit Profile* の *Remote Directory* で設定することができ、実際使用されたものは *Submit Remote Job* ウィンドウの *Remote Directory* 欄に表示されます。

  ジョブがリモートサーバ上で開始されると、標準出力は `winmos.o` 、標準エラーは `winmos.e` というファイルにそれぞれ出力されます。

- ファイルモードでサブミットしたジョブの状況を確認したい場合は、 *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。

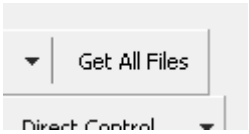
  サブミットしたジョブがあまりに早く終了した場合は、サブミットした直後であっても `---` と表示されます。

- 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。

- ファイルモードで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。

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。

7.4 Submit Remote 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。

Save Setting File
サーバ設定ファイルを上書き保存します。

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。

ウィ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。

ウィ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。

ウィンドウ内でも変更可能です。

Remote Directory
リモートサーバの作業フォルダを指定します。空の場合はホームディレクトリから (Local User ID)/(プログラム名)/(ファイル名) が作業フォルダになります。Local User ID は操作中の Windows におけるユーザ名で、Submit Remote Job ウィンドウのタイトルに表示されます。Local User ID に全角文字や半角スペースが含まれている場合は、内部的に半角英数文字に変換されてディレクトリ名が設定されます。`'/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 `(Local User ID)/(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 個づつで囲むと、(Local User ID) のディレクトリは作成されません。

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 Queueing 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。Test Connection の詳細は *Test Connection* **機能** で確認できます。

Connection メニュー

Test Connection and File Transfer
ウィンドウ内の *Test Connection* ボタンでも同様の操作が可能です。

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。ジョブがリモートサーバ上で開始されると、標準出力は `winmos.o` 、標準エラーは `winmos.e` というファイルにそれぞれ出力されます。

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。

Restert Terminated Job
ジョブスケジューラなどによりリモートジョブが強制的に中断された場合、本機能で計算を再開します。

Force Job Finalization
計算の異常終了により全てのファイルが生成されず、 *Get All Remote Files* が正常動作しない場合、本機能を実行すると強制的に終了処理が実行され、 *Get All Remote Files* を実行できるようになります。

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を中断します。サブミットした直後に表示されたジョブの ID を入力する必要があります。

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

Hide Other Users Info
qstat -a を実行したときに他のユーザの情報を表示するか指定します。

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。

7.5 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るため、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%	MPI プロセス数
%WM_NUM_THREAD%	1 MPI プロセスあたりのスレッド数（MPI を使わない場合は総スレッド数）
%WM_NUM_PARALLEL%	%WM_NUM_PROC%と%WM_NUM_THREAD%の積

7.6 リモートジョブの設定ファイル

プロファイルの設定は、Winmostar のインストールフォルダの `UserPref\winmos_profile.ini` に保存されます。読み込む際には、V8 以前の旧バージョンとの互換性維持のため、以下の優先順位で読み込まれます。

`UserPref\winmos_profile.ini > UserPref\winmos_server.ini > wm_system\RemoteJobdefault_profile.ini`

7.7 Windows サーバの利用方法

リモートサーバで Windows PC を使用することができます。使用するには下記のような事前準備が必要です。

- リモートサーバに OpenSSH サーバをインストールしてクライアントから SSH で接続できるようにします。
- リモートサーバに Winmostar をインストールして Winmostar ジョブマネージャを常に起動しておきます。

下記のように設定します。

- Profile 編集画面で Queue に JM(Windows) を選択します。
- Winmostar Path にリモートサーバにインストールされている Winmostar のパスを設定します。
- デフォルトのシェルスクリプトは使えないので、Use Template を選択しテンプレートファイルを作成します。Windows 上で動作するバッチファイルの内容にします。

下記のような他のジョブスケジューラとの操作上の違いがあります。

- *Test Connection* ボタンを押した時にジョブマネージャが起動しているかのチェックも行います。
- *List Jobs* ボタンで表示される情報はジョブマネージャと同じで左から番号、状態、優先度、コア数、ジョブ名、開始日時、終了日時、バッチファイルです。
- *Delete Job* ボタンでジョブを取り消す場合はジョブ名を入力します。

7.8 HTTP プロキシを経由した接続方法

リモートサーバに接続するのに HTTP プロキシサーバを介して SSH で接続する場合には下記のような手順で行います。

- **ツール** → *Cygwin* で Cygwin を起動します。
- 下記のようにコマンドを入力します。ここで、REMOTE_SERVER、PROXY_HOST_NAME、PROXY_PORT、USER_NAME はそれぞれリモートサーバ名、プロキシサーバ名、プロキシポート番号、ユーザ名で置き換えてください。

ssh -L1234:REMOTE_SERVER:22 -o "ProxyCommand connect-proxy -H PROXY_HOST_NAME:PROXY_PORT %h %p" USER_NAME@REMOTE_SERVER

- 上記の接続した状態で、Profile 編集画面で Host Name に localhost、Port に 1234 と設定します。

7.9 SSH 公開鍵・秘密鍵認証での接続方法

Winmostar のリモートジョブ機能では SSH 公開鍵・秘密鍵認証での接続方法もサポートしています。

RSA 方式では接続できない場合がありますので、Ed25519 方式での接続を推奨します。ターミナルで鍵を生成する場合、 **`$ ssh-keygen -m pem -t ed25519 -f (秘密鍵のファイル名)`** と実行します。

7.10 Test Connection 機能

ジョブの設定ウィンドウ、Remote Server Profile ウィンドウ、Control Remote Job/Server ウィンドウ、Submit Remote Job ウィンドウにおいて、リモートジョブの状態をテストする Test Connection 機能を利用することができます。

テストに失敗するとテストに使用したファイルを開くことができます。test_connection.log にはテストの詳細情報が記載されており、設定の見直しに有用です。

***SSH* 接続のみ** では、send_file.txt というファイルをサーバに sftp で send してから receive することで、SSH 接続のテストを行います。このテストに失敗した場合は、Host Name, Port, User Name, Password, SSH Private Key, Port Forward の各種設定を見直してください。

***SSH* 接続とジョブスケジューラ** では、 ***SSH* 接続のみ** のテストに加え、remote_test.sh という簡単なシェルスクリプトを実際にジョブスケジューラにサブミットし、そのシェルスクリプトが期待された出力を返すか確認することでジョブスケジューラのテストを行います。このテストは、実際にジョブスケジューラに空きがあり、サブミットしたジョブが即座に実行される場合でないと失敗します。ジョブスケジューラに空きがあるにも関わらずこのテストに失敗する場合は、Queue, Options, Prefix for Queueing Commands の各種設定を見直してください。submit_stdout.txt にはサブミットしたコマンドの標準出力が出力されます。remotejob_stdout.txt には実行されたジョブの標準出力が出力されます。

***SSH* 接続とジョブスケジューラと（ソルバ名）** では、 ***SSH* 接続とジョブスケジューラ** のテストに加え、各種ソルバの簡単なジョブを実際にジョブスケジューラにサブミットし、そのジョブが期待された出力を返すか確認することでソルバのテストを行います。このテストは、実際にジョブスケジューラに空きがあり、サブミットしたジョブが即座に実行される場合でないと失敗します。ジョブスケジューラに空きがあるにも関わらずこのテストに失敗する場合は、テンプレートスクリプトの各種設定を見直してください。submit_stdout.txt にはサブミットしたコマンドの標準出力が出力されます。remotejob_stdout.txt, remotejob_stderr.txt には実行されたジョブの標準出力、標準エラーが出力されます。winmos_script.txt はサブミットされたシェルスクリプトです。

Chapter 8

アドオン

8.1 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。

8.1.1 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

Preferences
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。

8.1.2 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 insersions 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。

8.1.3 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。

8.1.4 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。

8.1.5 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。

8.2 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。

DCDFTBMD 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。

8.2.1 キーワード設定

DCDFTBMD の計算条件を設定します。設定後 *OK* ボタンを押してください。

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。

Continue Simulation
継続ジョブを実行します。 キーワード RESTART=TRUE が設定され、 `restart` の情報から計算が再開されます。

詳細は **実行** を参照してください。

# of Threads
OpenMP の並列数を指定します。

Use MPI
MPI を使用します。横の欄には MPI 並列数を指定します。

Basic

Charge
系全体の電荷を指定します。

Multiplicity
系全体のスピン多重度を指定します。

Parameter Set
使用するパラメータの種類を選択します。Winmostar のインストールフォルダ（デフォルトでは `C:\winmos11\` ）の下の `DFTBParam` フォルダに配置したフォルダの名前がリストアップされます。`DFTBParam` フォルダの下に置くフォルダは、skf などのパラメータファイルを含む必要があります。例えば、 `C:\winmos11\DFTBParam\mio-1-1\C-C.skf` という階層構造が想定されます。

Open Directory for Parameter Set
前述の `DFTBParam` フォルダを開きます。

Reload Parameter Set
前述の DFTBParam フォルダを再度読み込み、 *Parameter Set* のリストを更新します。

Executable
計算に使用する DCDFTBMD のバイナリを指定します。MPI を使用するときは dftb_mpiomp_mpich.00.x などの MPI 対応版のバイナリを指定する必要があります。ここで指定するバイナリへ、リモートサーバ上で PATH を通しておく必要があります。

Advanced

Method
SCC または NCC を選択します。

THIRDFULL
SCC ハミルトニアンに対する 3 次補正を使用します。

DAMPXH
X-H ペアに対する SCC 相互作用の短距離でのダンピングを使用します。

MAXITER
SCC サイクルの最大数を指定します。

ECONV
エネルギー変化の収束条件を指定します。(atomic unit)

DCONV
グラジエント変化の収束条件を指定します。(atomic unit)

DISP
経験的分散力補正を使用します。

DISPTYPE
経験的分散力補正の種類を指定します。

DC
分割統治法を使用します。

SUBTYPE
部分系の作り方を指定します。

BUFRAD
球状バッファ領域の半径を指定します。(angstrom)

DELTAR
SUBTYPE=AUTO で系を立方体空間に分割する際のグリッド (angstrom)

OPT/FREQ

OPT
構造最適化計算を実行します。

MAXITER
構造最適化サイクルの最大数を指定します。

DCONV
グラジエント変化の収束条件を指定します。(atomic unit)

FREQ
調和振動解析を実行します。

MD
分子動力学計算を実行します。

NSTEP
ステップ数を指定します。*Continue Simulation* にチェックを入れている場合は、継続前のジョブのステップ数とこれから流すジョブのステップ数の和を入力する必要があります。

DELTAT
時間刻みを指定します。 (second)

BATHTEMP
NVT および NPT アンサンブルを利用するときの熱浴温度を指定します。 (Kelvin)

Ensemble
アンサンブルの種類を指定します。

NVTTYPE
熱浴の設定を指定します。

INITTEMP
初期温度を指定します。 (Kelvin)

PRINT
シミュレーション中の座標等のファイルへの出力頻度を指定します。

CALCPRESSURE
圧力を計算します。継続ジョブを行う際には、引継ぎ前のジョブの設定から変更することができないので注意する必要があります。

Properties

PRINT

MO
分子軌道係数を出力します。（部分系の数が 1 の場合のみ）

ATOME
全エネルギーに対する各原子からの寄与を出力します。

HS
ゼロ次ハミルトニアン、重なり行列を出力します。（部分系の数が 1 の場合のみ）

FORCE
エネルギーと力の計算を行います。

STRESS
応力テンソルと格子ベクトルの微分計算を行います。

Options

Restore Working Folder
継続ジョブが異常終了時など、作業フォルダを実行前の状態に戻す際にクリックします。

8.2.2 実行

DCDFTBMD を実行するために、 **リモートジョブ** を開きます。詳細な操作方法は **リモートジョブ** を参照してください。

状況に応じて実行方法が異なります。

- **（デフォルト）** ***Continue Simulation*** **にチェックがない場合**
  実行時にユーザが指定した名前で入力ファイル（拡張子 dci）を保存し、それを用いて計算を実行します。
- ***Continue Simulation*** **にチェックがある場合**
  メインウィンドウで開かれた入力ファイルに紐づけられた既存の作業フォルダのバックアップを作成し、新たに作成した作業フォルダの中に入力ファイルを `dftb.inp` として保存し、それを用いて計算を実行します。

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.dci` の時のファイル/フォルダ名を併記しています。

種類	説明
dco ファイル `water.dco`	DCDFTMD の標準出力ファイルです。 作業フォルダの `dftb.out` をコピーしたものです。
シェルスクリプト `water.sh`	DCDFTBMD 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。
conf ファイル `water_conf.sh`	上記シェルスクリプトの中で使われる変数を収めた ファイルです。
作業フォルダ `water_dc_data\`	作業フォルダです。

作業フォルダ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
dftb.inp	実際に DCDFTMD に渡される入力ファイル
dftb.out	標準出力ファイル
dftb.dat	詳細出力ファイル
traject	MD 計算におけるトラジェクトリファイル
restart	リスタート用ファイル

ヒント: 作業フォルダ

- 作業フォルダとは、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、作業フォルダの名前は 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フォルダ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フォルダ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、作業フォルダが 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。**

8.2.3 ログを表示 (dco)

dco（標準出力）ファイルをテキストエディタで開きます。

8.2.4 詳細出力ファイルを表示 (dat)

詳細出力ファイルをテキストエディタで開きます。

8.2.5 アニメーション

構造最適化 (dco)

dco ファイルを選択し、構造最適化計算のトラジェクトリをアニメーション表示します。

アニメーション表示の操作方法は **アニメーション操作エリア** を参照してください。アニメーション操作エリアから動径分布関数、自己拡散係数、平均二乗変位、各原子の変位などを計算できます。

MD (traject)

dci ファイルと traject 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 **アニメーション操作エリア** を参照してください。アニメーション操作エリアから動径分布関数、自己拡散係数、平均二乗変位、各原子の変位などを計算できます。

8.2.6 エネルギー変化

ログファイルを選択し、エネルギー、温度などの各種熱力学量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。

8.3 Towhee

Towhee に関するメニューです。

8.3.1 力場を割り当て

Gibbs Ensemble Monte Carlo (GEMC) または Grand Canonical Monte Carlo 計算を実行する場合は、この時点でメインウィンドウはアニメーション表示状態となっており、アニメーションのフレーム数は 2 である必要があります。また、GEMC の場合は 1 フレーム目に 1 相目、2 フレーム目に 2 相目が作成されている必要があります。GCMC の場合は 1 フレーム目に計算対象の系、2 フレーム目に 1 フレーム目には含まれない分子を作成しておく必要があります。

力場を設定します。ソルバの種類に応じて、選択肢が変化します。

力場を割り当てた後、割り当てた力場を確認する場合は **情報を見る** を使用します。

LAMMPS の場合、この機能を利用する時点でメインウィンドウに速度を含んだ gro ファイルを開いていると、速度を含んだ data ファイルを生成します。同様に Gromacs の場合、速度を含んだ data ファイルを開いている

と、速度を含んだ gro ファイルを生成します。Gromacs および LAMMPS の計算データを速度付きで引き継ぎたいときに有用です。

一度力場を割り当てて MD 計算を実行すると、結合次数が力場パラメータの平衡長から自動判定されます。力場の種類によっては、その際に決定された結合次数が力場割り当て前の結合次数とは異なる場合があります。一部の力場は、結合次数の影響を受けます。力場割り当て前の結合次数に戻したい場合は **結合をファイルから読み込む** を使用してください。

自動でパラメータを割り当て

新たに力場パラメータを割り当てます。分子表示エリア中の結合で互いに連結した構造が 1 つの分子として認識されます。

(一般)

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, GAFF2, OPLS/AA-L+GAFF の場合は **acpype** 、Dreiding の場合は内製プログラム、UFF の場合は OpenBabel を独自に拡張したプログラム、OPLS-AA の場合は mktop が使用されます。OPLS/AA-L+GAFF は非結合ポテンシャル (LJ パラメータ等) を OPLS-AA/L、分子内の結合ポテンシャル (結合、結合角、二面角等) を GAFF で設定します。Dreiding の設定は `polymer/dreiding.lib.txt` に書かれています。UFF の詳細は *Universal Force Field* を確認してください。

Exception

特定の分子または結晶に対し、(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または結晶にチェックを入れ、右の欄で LJ パラメータを入力します。*Automatically assign parameters* をクリックすると、UFF または Dreiding の LJ パラメータが自動で割り当てられます。*Use bond coefficient* または *Use angle coefficient* にチェックを入れると、その右の欄に入力した係数を用いて結合する原子間の bond または angle に対し、harmonic な bond および angle potential が設定されます。これらはあくまで近似的な分子・結晶を表現するための機能です。*Use bond coefficient* または *Use angle coefficient* を利用しない場合は、ここで指定された分子または結晶を構成する原子は LJ ポテンシャルまたは静電ポテンシャルのみで相互作用し、形状が崩れる場合があります。

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。

(タンパク質)

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。

(水分子)

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。

タンパク質向けに [position_restraints] を追加

タンパク質が存在する場合は *Advanced* 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。

選択原子向けに [position_restraints] を追加

ユーザが指定する分子に対し、 *Advanced* 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。

選択原子向けに [distance/angle/dihedral_restraints] を追加
ユーザが指定する分子に対し、 *Advanced* 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。

割り当て後編集ウィンドウを開く
力場パラメータを自動で割り当てた後、 *Edit Force Field* ウィンドウを開きます。

Edit Force Field ウィンドウ
atoms, bonds, anlges, dihedrals の表中には、Gromacs のフォーマットで力場パラメータを入力します。表中の項目を分子表示エリアから選択したい場合は、まず分子表示エリア中で選択したい原子（bond の場合は bond を構成する 2 原子、angle の場合は angle を構成する 3 原子、以下同様）をクリックした後で *Select item clicked at viewport* をクリックします。

このウィンドウを閉じる際に、bonds の情報から 1-4 ペアを検出し、Gromacs における [pairs] レコードを自動生成します。4 員環、5 員環内の 1-4 ペアについては [pairs] を生成しません。

File メニュー

Import top file
Gromacs の top ファイルを読み込み、表示されている原子に割り当てます。

Export top file
編集中の力場パラメータを Gromacs の top 形式で出力します。

Export mol2 file
表示中の分子構造を mol2 形式で出力します。

Export itp file
編集中の力場パラメータを Gromacs の itp 形式で出力します。

Update using itp file (bond/angle/dihedraltypes)
指定した itp ファイルに書かれた bondtypes, angletypes, dihedraltypes で編集中の力場パラメータを上書きします。

Update using itp file (atom/bond/angle/dihedraltypes)
指定した itp ファイルに書かれた atomtypes, bondtypes, angletypes, dihedraltypes で編集中の力場パラメータを上書きします。

Action メニュー

Complement
現時点で力場パラメータが割り当てられていない自由度に対し、指定した種類の汎用力場を割り当てます。複数の汎用力場を一つの分子に割り当てられてしまうため、その際は計算結果の検証を行ってください。

Assign equilibrium bonds/angles from current structure
現在表示されている分子の結合長・結合角を力場パラメータの平衡長・平衡角に設定します。汎用力場で割り当てられる平衡長・平衡角はその他のパラメータと合わせて注意深くデザインされているため、現在割り当てられている平衡長・平衡角が著しく本来の結合長・結合角から外れている場合のみ使用することを推奨します。

Add undefined dihedrals
dihedrals の表中に定義されていない二面角を追加します。

Duplicate selected item
表中で選択された項目を複製します。periodicity 違いの dihedral パラメータを作成したいと

きなどに有用です。

Delete selected item
表中で選択された項目を削除します。

Add unused dihedral terms
全ての dihedral に対し指定した periodicity のパラメータを作成したい場合に使います。

Setup pair_style hybrid
LAMMPS の場合のみ使用できます。表示されている分子または結晶のうち、指定した部分に EAM, Tersoff 等のポテンシャルファイルで設定する力場を指定します。

Dump Now
現在の設定に基づき、力場が割り当てられたファイルを生成します。

注釈:

- 力場の情報をテキストエディタ等で編集してカスタマイズしたい場合は、まず *Dump Now* を使用して力場情報を含むファイルを保存し、Gromacs の場合は top、LAMMPS の場合は data ファイルをテキストエディタ等で編集してください。
- 次に、Gromacs の場合は、 **ファイル** → **ファイルをインポート** で gro ファイルをインポートし（ **破棄して読み込み** を選択）、 **力場を割り当て** で **トポロジファイルに書かれたパラメータを使用** を選択して *OK* ボタンをクリックしてください。そして、top ファイルの場所を聞かれるので、先ほど保存・編集した top ファイルを開いてください。
- LAMMPS の場合は、 **ファイル** → **ファイルをインポート** で data ファイルをインポートし（ **破棄して読み込み** を選択）、 **力場を割り当て** で **メインウィンドウのファイルに書かれたパラメータを使用** を選択し *Next* > ボタンをクリックしてください。data ファイルに力場の情報が書かれていない場合は、 **力場の種類を選択してください** と出るので、使用する汎用力場の種類を選択して *OK* ボタンをクリックしてください。
- 電荷はメインウィンドウに表示されている構造から取得されます。メインウィンドウに複数種類の電荷が設定されている場合は（例えば GAMESS のログファイルを開き Mulliken 電荷と Lowdin 電荷が設定されている場合など）、（高優先）User 電荷＞ NBO 電荷＞ Lowdin 電荷＞ ESP 電荷＞ Mulliken 電荷（低優先）の順番に優先され使用されます。

パラメータファイルを使用（無機物、ReaxFF、DPD 向け）
（LAMMPS 向け）無機物用ポテンシャル、ReaxFF または DPD を使用したい場合に選択します。 *Next* > ボタンを押した後に、実際に使用する力場の種類を指定します。pair_style と Potential file をユーザが自由に入力できるようにするためには、[ツール]-[環境設定]-[計算] において設定する必要があります。結果解析用に top ファイルが自動で生成されますが、実際の原子間力パラメータを反映したものではないため注意してください。

トポロジファイルに書かれたパラメータを使用
（Gromacs 向け）既に存在している top ファイルを用いて MD 計算を実行する場合に選択します。メインウィンドウには対応する gro ファイルを開くかインポートしておく必要があります。開くかインポートした後に構造を編集すると top ファイルとの対応が破綻し計算できなくなります。開くかインポートした後に力場情報に影響しない範囲で（例えば結合変更せずに座標だけを編集するなど）構造を編集してから本機能を使いたい場合は、構造の編集後に gro 形式でエクスポートし、そのファイルを開くかインポートしてから本機能を利用してください。

メインウィンドウのファイルに書かれたパラメータを使用
（LAMMPS 向け）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。メインウィンドウには使用する data ファイルを開くかインポートしておく必要があります。開くかインポートした後に構造を編集すると top ファイルとの対応が破綻し計算できなくなります。 *Next* > ボタンを押した後に、使用する力場の種類を指定します。

8.3.2 ワークフロー設定

プロジェクトモードにおける Towhee の計算フローを設定、実行します。

Preset
設定のプリセットを呼び出し、保存します。

# of Jobs
ジョブの数を指定します。

Enable parameter/structure scan
この機能を使うためにはアドオンの購入が必要です。特定のパラメータだけが異なる複数の計算を流したり（パラメータスキャン）、複数の構造に対し同一のパラメータで計算を流す（構造スキャン）ことが可能となります。

Config をクリックするとスキャン計算の設定画面が出現します。

パラメータスキャンの際は *Target Variable* に%WM_SCAN1%を選択し、 *Values* の各行に%WM_SCAN1%に設定したいパラメータを入力します。そして、ワークフロー設定ウィンドウまたはキーワード設定ウィンドウにおいて設定したいパラメータに%WM_SCAN1%と入力します。Values の各行にスペース区切りで値が記入されている場合は、1 列目の値を%WM_SCAN1_1%、2 列目の値を%WM_SCAN1_2%... といった具合に参照することができます。

並列数をスキャンしたい場合は、# of Threads または# of Procs を選択します。

構造スキャンの際は、分子表示エリアでアニメーションが出現した状態（SDF ファイルを開くなど）で、 *Target Variable* に%WM_STRUCT%を選択します。また、構造スキャン実行時には作業フォルダに label_scan_struct.txt というファイル名で、アニメーション表示エリアのリストの文字列が保存されます。

スキャン計算の終了後は **ファイル** → **プロジェクト** → **スキャン結果表示** を利用して計算結果を集計します。

Import
Export で出力した設定を読み込みます。ボタン右の矢印をクリックすると、過去同じプロジェクトまたは Winmostar 上で使用した設定を呼び出すことができます。

Export
設定をファイルに出力します。

OK
設定した内容で計算を実行またはファイルを生成します。詳しくは **プロジェクトモードの場合** を参照してください。

Details
計算条件を詳細に設定します。 **キーワード設定** が立ち上がります。

Ensemble
アンサンブルの種類を指定します。

	設定内容
NVT	ensemble=nvt Ratio(Vol)=0 Ratio(Insert)=0
NPT	ensemble=npt Ratio(Vol)=0.001 Ratio(Insert)=0
uVT	ensemble=uvt Ratio(Vol)=0 Ratio(Insert)=0.001
GEMC-NVT	ensemble=nvt Ratio(Vol)=0.001 Ratio(Insert)=0.001
GEMC-NPT	ensemble=npt Ratio(Vol)=0.001 Ratio(Insert)=0.001

Temperature
温度を指定します。

Pressure
圧力を指定します。

# of steps
実行するステップ数を指定します。

# of snapshots
スナップショットの出力数を指定します。

Chemical Potential
化学ポテンシャルを指定します。

For equilibration
本計算ではなく平衡化計算の際に使用します。統計力学的な妥当性はないが系が早く緩和するアルゴリズムを使用します。

	設定内容
True	rmin=0.01 Specify nstep/maxdispfreq=False
False	rmin=1.0 Specify nstep/maxdispfreq=True

Calc as Rigid
CBMC の確率を強制的に 0 にし、分子を剛体として計算します。内部自由度の計算が省略されるため計算速度が向上します。

Precision
計算精度を設定します。

	設定内容
Low	rcut=8 ewald_prec=1d-4
Medium	rcut=10 ewald_prec=1d-5
High	rcut=12 ewald_prec=1d-6

8.3.3 キーワード設定

Towhee 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 *Towhee* **実行** を参照してください。

電荷が割り当てられていない分子がある場合は、 **自動で電荷を割り当て** が自動で立ち上がります。力場が割り当てられていない場合は、 **力場を割り当て** が自動で立ち上がります。

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。

Continue Simulation

継続ジョブを実行します。

詳細は *Towhee* **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。各プリセットは以下のキーワードを変更します。

	NVT Equil	NVT Prod	NPT Equil	NPT Prod
ensemble	nvt	nvt	npt	npt
Ratio(Vol)	0	0	0.001	0.001
Ratio(Insert)	0	0	0	0
rmin	0.01	1.0	0.01	1.0
Specify nstep/maxdispfreq	False	True	False	True

	uVT Equil	uVT Prod
ensemble	uvt	uvt
Ratio(Vol)	0	0
Ratio(Insert)	0.001	0.001
rmin	0.01	1.0
Specify nstep/maxdispfreq	False	True

	GEMC-NVT Equil	GEMC-NVT Prod	GEMC-NPT Equil	GEMC-NPT Prod
ensemble	nvt	nvt	npt	npt
Ratio(Vol)	0.001	0.001	0.001	0.001
Ratio(Insert)	0.001	0.001	0.001	0.001
rmin	0.01	1.0	0.01	1.0
Specify nstep/maxdispfreq	False	True	False	True

Basic

nstep

ステップ数を指定します。

ensemble
アンサンブルを指定します。

temperature
温度を指定します。

pressure
圧力を指定します。

chempot
化学ポテンシャルを指定します。

random_seed
乱数のシードを指定します。

random_allow_restart
継続ジョブにおいて前のジョブにおける乱数生成の状態を引き継ぎます。

Specify ratio instead of cumulative probabilities
チェックが入っている場合は各操作（並進、回転、CBMC、体積、挿入）の確率を指定します。チェックが入っていない場合は積算確率を指定します。CBMC は分子内自由度の更新操作です。

Disable CBMC
CBMC の確率を強制的に 0 にします。すべての分子が剛体として扱われます。

Fix 1st component
系内に最初に登場する分子種（GEMC の場合は 1 つ目、2 つ目の系を通じて最初に登場する分子種）の座標を凍結します。

Specify nstep/maxdispfreq
trmaxdispfreq と volmaxdispfreq を、nstep との比で与えます。

trmaxdispfreq
並進・回転操作の最大変位を自動更新する頻度を指定します。

volmaxdispfreq
体積操作の最大変位を自動更新する頻度を指定します。

Advanced (1)

pmtracm
並進操作の積算確率を指定します。Specify ratio instead of cumulative probabilities にチェックが入っている場合は直接入力できず、自動的に算出された値が表示されます。

pmtcmt
並進操作の各分子種に対する積算確率を指定します。2 種類以上の分子がある場合はスペース区切りで入力します。

rmtrac
並進操作の最大変位を指定します。

tatrac
trmaxdispfreq で更新する際に目標とする採択率を指定します。

pmrotate
回転操作の積算確率を指定します。Specify ratio instead of cumulative probabilities にチェックが入っている場合は直接入力できず、自動的に算出された値が表示されます。

pmromt
回転操作の各分子種に対する積算確率を指定します。2 種類以上の分子がある場合はスペース区切りで入力します。

rmrot
回転操作の最大変位を指定します。

tarot
trmaxdispfreq で更新する際に目標とする採択率を指定します。

pmcb
CBMC 操作の積算確率を指定します。CBMC は分子内自由度の更新操作です。Specify ratio instead of cumulative probabilities にチェックが入っている場合は直接入力できず、自動的に算出された値が表示されます。

pmcbmt
CBMC 操作の各分子種に対する積算確率を指定します。2 種類以上の分子がある場合はスペース区切りで入力します。

pmall
分子の再生成操作において分子全体を再生成する確率を各分子種に対して指定します。2 種類以上の分子がある場合はスペース区切りで入力します。

pmvol
体積操作の積算確率を指定します。Specify ratio instead of cumulative probabilities にチェックが入っている場合は直接入力できず、自動的に算出された値が表示されます。

pmvlpr
各相に対する体積操作の積算確率を入力します。2 つ以上の相があるときはスペース区切りで入力します。

rmvol
体積操作の最大変位を指定します。

tavol
volmaxdispfreq で更新する際に目標とする採択率を指定します。

Advanced (2)

pmuvtcbswap
GCMC における挿入・削除操作の積算確率を指定します。Specify ratio instead of cumulative probabilities にチェックが入っている場合は直接入力できず、自動的に算出された値が表示されます。

pmuvtcbmt
GCMC における挿入・削除操作の各分子種に対する積算確率を指定します。2 種類以上の分子がある場合はスペース区切りで入力します。

pm2boxrbswap
GEMC における剛体的な挿入操作の積算確率を指定します。Specify ratio instead of cumulative probabilities にチェックが入っている場合は直接入力できず、自動的に算出された値が表示されます。

pm2rbswmt
GEMC における剛体的な挿入操作の各分子種に対する積算確率を指定します。2 種類以上の分子がある場合はスペース区切りで入力します。

pm2rbswpr
GEMC における剛体的な挿入操作の各相間に対する積算確率を指定します。3 相以上の分子がある場合はスペース区切りで入力します。

pm2boxcbswap
GEMC におけるフレキシブルな挿入操作の積算確率を指定します。Specify ratio instead of cumulative probabilities にチェックが入っている場合は直接入力できず、自動的に算出された値が表示されます。

pm2cbswmt
GEMC におけるフレキシブルな挿入操作の各分子種に対する積算確率を指定します。2 種類以上の分子がある場合はスペース区切りで入力します。

pm2cbswpr
GEMC におけるフレキシブルな挿入操作の各相間に対する積算確率を指定します。3 相以上の分子がある場合はスペース区切りで入力します。

Output

printfreq
標準出力に統計量を出力する頻度を指定します。

moviefreq
トラジェクトリファイルを出力する頻度を指定します。

blocksize
ブロック平均する際のブロックのサイズを指定します。

backupfreq
リスタートファイルを出力する頻度を指定します。

restartfreq
名前にステップ数がついたリスタートファイルを出力する頻度を指定します。

pdb_output_freq
PDB ファイルを出力する頻度を指定します。

pressure_virial_freq
ビリアル圧力を計算する頻度を指定します。

chempotperstep
化学ポテンシャル計算のために追加の挿入操作の 1 MC ステップあたりの回数を指定します。

loutchempotdata
化学ポテンシャルを専用のファイルに出力するか指定します。

Interaction

rcut
vdw(LJ) ポテンシャルのカットオフ半径を指定します。

rmin
これ以上原子が近づかない hard inner cutoff を指定します。妥当な値にすることで計算を高速化できます。

rcutin
CBMC で使われる inner cutoff を指定します。

ltailc
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。

electrostatic_form
静電ポテンシャル計算の有無を指定します。

coulombstyle
静電ポテンシャルの計算方法を指定します。

kmax
Ewald 法における最大波数を指定します。

kalp
Ewald 法の alpha パラメータとセルの短辺の積を指定します。

rcelect
Ewald 法の実空間カットオフ半径を指定します。

ewald_prec
Ewald 法の相対精度を指定します。

Options

Restore Working Folder
継続ジョブが異常終了時など、作業フォルダを実行前の状態に戻す際にクリックします。

Reset
設定をリセットします。

Import
設定ファイルを読み込みます。

Export
設定ファイルを出力します。

8.3.4 Towhee 実行

Towhee 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）*Continue Simulation* にチェックがない場合**
  wmm ファイルを新規に生成してからジョブを開始します。
- ***Continue 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 wmm ファイルに紐づけられた作業フォルダの中にある `towhee_final` 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.wmm` の時のファイル/フォルダ名を併記しています。なお、`wmm` ファイルは Winmostar の独自形式の分子構造ファイルであり、Towhee が直接読み込むものではありません。

種類	説明
bat ファイル `water.bat`	Towhee 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。
作業フォルダ `water_twh_tmp\`	作業フォルダです。

作業フォルダ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
towhee_input	計算条件、力場情報の一部が書かれた主要な入力ファイルです。
towhee_ff	力場パラメータなどが書かれたファイルです。
towhee_coords	初期座標が書かれたファイルです。
towhee_initial	継続ジョブ時における、前のジョブの towhee_final です。
lammps_data	towhee_coords , towhee_ff , towhee_input の生成に使われた LAMMPS 用座標・力場ファイルです。
gromacs.top	lammps_data と同等条件の Gromacs 用トポロジファイルです。結果解析に使うことが可能です。
towhee.log	Towhee の標準出力（ログファイル）です。
towhee_movie	Towhee の計算で生成されたトラジェクトリファイルです。
towhee_final	計算終了時の最終状態（座標、モンテカルロ法の各種パラメータなど）が書かれたファイルです。

ヒント：作業フォルダ

- 作業フォルダとは、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、作業フォルダの名前は 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フォルダ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フォルダ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、作業フォルダが 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。**

ジョブは *Winmostar Job Manager* を通じて実行されます。

8.3.5 ログを表示

Towhee のログファイル（ towhee.log ）をテキストエディタで開きます。

8.3.6 ログの抜粋を表示

ログファイルの主要な情報を抜粋して表示します。

8.3.7 アニメーション

towhee_input と towhee_movie を選択し、MC 計算のトラジェクトリをアニメーション表示します。

アニメーション表示の操作方法は **アニメーション操作エリア** を参照してください。

8.3.8 エネルギー変化

towhee.log 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。

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。

Chapter 9

原子・分子構造表示の調整方法

9.1 MD など多数分子がある中で特定分子を表示する方法

1. まず表示したい系全体を通常通り読み込みます。アニメーションでも同様です。
2. 表示したい分子をグループ選択します。グループ選択の方法は **選択メニュー** を参照してください。
3. **表示** → **透明化** をクリックし、 **全原子を透明化** をクリックした後 **グループ選択原子を不透明化** をクリックし、 **透明度** を適宜調整します。

9.2 結晶においてシミュレーションセル直上の原子をセル両端に表示する・しない方法

表示 → **表示プリセット** にて切り替えることができます。

より細かく調整したい場合は **ツール** → **環境設定** → **表示** → **表示項目** → **両端に複製されたセル境界上の原子** の設定を調整します。

9.3 特許出願書類用の作図（白黒２階調表示）をする方法

ツール → **環境設定** をクリックし、 **表示** タブで **特許出願用表示** にチェックを入れ *OK* をクリックします。

輪郭線が粗い場合は、カメラをズームインしてください。

9.4 各原子を電荷の値でカラーリングする方法

メインウィンドウのモデルが電荷情報を持っている状態で、 **表示** → *Winmostar Viewer* をクリックします。 Winmostar Viewer が開いたら *View* → *Representations* をクリックし、 *Color* を Property に変更します。

Chapter 10

他のソフトウェアとの連携

10.1 ChemDraw/Chem3D との連携

ChemDraw または Chem3D はユーザが自己責任で入手しインストールしてください。

ChemDraw 上で構造式を描画して作成した分子は、次の *SMILES* **形式** または *mol* **形式** で Winmostar に読み込むことができます。Chem3D で作成した 3 次元構造を読み込む場合は、SMILES または mol 形式を経由すると立体構造や水素原子の情報が欠落するため、Chem3D から *Gaussian* **入力形式** で Winmostar に読み込ませてください。

10.1.1 ChemDraw から SMILES 形式で読み込む場合

操作手順は以下の通りです。

1. ChemDraw で分子をモデリングした後、 *Edit* → *Copy As* → *SMILES* をクリックします。
2. Winmostar で **ファイル** → **インポート** → *SMILES* をクリックし、 *Enter SMILES* の欄に先ほどコピーした文字列をペーストします。
3. *Import* ボタンをクリックすると、メインウィンドウに分子がモデリングされます。

10.1.2 ChemDraw から mol 形式で読み込む場合

操作手順は以下の通りです。

1. ChemDraw で分子をモデリングした後、 *File* → *Save As* をクリックし、MDL MolFile 形式を選択しファイルを保存します。
2. Winmostar で先ほど保存したファイルを開きます。ChemDraw で出力した mol ファイルには水素が含まれず、結合長も適切でないため、Winmostar 上で自動的に結合長の調整と水素の付加が行われます。

10.1.3 Chem3D から Gaussian 入力形式で読み込む場合

操作手順は以下の通りです。

1. Chem3D で分子をモデリングした後、 *File* → *Save As* をクリックし、 *Gaussian Input (.gjf,.gjc)* **形式** を選択しファイルを保存します。
2. Winmostar で先ほど保存したファイルを開くと、メインウィンドウに分子が表示されます。その後、使用したいソルバのキーワード設定から計算内容を設定してください。

10.2 VMD との連携

VMD はユーザが自己責任で入手しインストールしてください。

10.2.1 アニメーションの場合

1. アニメーションを表示している状態で、アニメーション操作エリア（メインウィンドウ右上）の *Options* → *Export* → *Animated GRO File...* をクリックし、gro ファイルを保存します。
2. VMD を起動し、 *File* → *New Molecule...* をクリックし、1 で保存した gro ファイルを開きます。

10.2.2 アニメーションではない場合

1. **ファイル** → **ファイルをエクスポート** をクリックし、gro または pdb 形式で保存します。
2. VMD を起動し、 *File* → *New Molecule...* をクリックし、1 で保存したファイルを開きます。

10.3 VESTA との連携

VESTA はユーザが自己責任で入手しインストールしてください。

1. **ツール** → **環境設定** をクリックし、**基本** タブで *Cube* **ファイルの表示に外部ビューワを使用** にチェックを入れ、**プログラムパス** タブで *Cube Viewer* で VESTA の実行ファイル（`VESTA.exe`）を指定してください。
2. Winmostar で cube ファイルを開くと *Cube Plot* ウィンドウが開くので、 *Draw* ボタンをクリックすると VESTA が開きます。

Chapter 11

その他のトピック

11.1 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。

入力ファイルを SMILES として認識し分子を構築 (Balloon を使用) （プロフェッショナル版プレミアム、エリート限定）	-smilesballoon
入力ファイルを SMILES として認識し分子を構築 (OpenBabel を使用) （プロフェッショナル版プレミアム、エリート限定）	-smilesbabel
MOPAC の実行	-mopac1, -mopac2, -mopac3 (それぞれ **ツール** → **環境設定 メニュー** → **プログラムパス** において選択した 3 種の MOPAC バイナリに対応)
分子表面積, 体積	-molsv
アスペクト比	-aspect
慣性半径	-radgyr
結合長を自動調整	-adjust
すべての原子に付加	-hadd
すべての水素を削除	-hdel
簡易構造最適化	-clean
RESP **電荷を使用** （1 分子のみ対応）	-resp (電荷値、中性分子の場合は 0)
AM1-BCC/Gasteiger **電荷を使用** （AM1-BCC、1 分子のみ対応） （プロフェッショナル版プレミアム、エリート限定）	-am1bcc (電荷値、中性分子の場合は 0)
溶媒を配置/セルを構築 （第一引数は無視されます）	-pack (分子種 1 のファイル名):(分子種 1 の個数):(分子種 2 のファイル名):(分子種 2 の個数)(以降、同様に列挙) (密度 [g/cm^3])
分子を挿入 （プロフェッショナル版エリート限定）	-insertmol (分子種 1 のファイル名):(分子種 1 の個数):(分子種 2 のファイル名):(分子種 2 の個数)(以降、同様に列挙)
LAMMPS の計算（ローカルジョブ） （lmpset ファイルは LAMMPS キーワード設定ウィンドウの Save ボタンから取得可能） （lmpset ファイルは第一引数からの相対パスで指定）	-lammps (力場の種類) (1 つ目のジョブのプリセット名または lmpset ファイル名):(2 つ目のジョブのプリセット名または設定ファイル名):(以降、同様に列挙) (並列数)
LAMMPS 座標ファイルの出力 （力場の種類は **力場を割り当て** を参照） （プロフェッショナル版プレミアム、エリート限定） （一般分子向けの力場で一部分子種に UFF または Dreiding を「GAFF(1=UFF)」などと指定）	-lammpsfile (一般分子向けの力場の種類) (水分子向けの力場の種類) (出力する data ファイルの名前)
Gromacs 座標・力場ファイルの出力	-gromacsfile (一般分子向けの力場の種類) (水分子向けの力場の種類) (出力する gro ファイルの名前) (出力する top ファイルの名前)

使用例:

```
\"C:\\winmos11\\winmostar.exe\" C00 -s -smilesballoon -outfile ethanol.mol2
\"C:\\winmos11\\winmostar.exe\" \"C:\\winmos11\\samples\\dbt.dat\" -s -mopac1
\"C:\\winmos11\\winmostar.exe\" \"C:\\winmos11\\samples\\dbt.dat\" -s -molsv 1 2.0 0.
↪02
\"C:\\winmos11\\winmostar.exe\" \"C:\\winmos11\\samples\\dbt.dat\" -s -o pdb
\"C:\\winmos11\\winmostar.exe\" \"C:\\winmos11\\samples\\dbt.dat\" -s -adjust -hadd -
↪clean -o gjf
\"C:\\winmos11\\winmostar.exe\" \"C:\\winmos11\\samples\\ch4.mol2\" -s -pack ch4.
↪mol2:100:ethanol_am1.mol2:2 0.6 -outfile ch4_100_etoh_2.mol2
\"C:\\winmos11\\winmostar.exe\" \"C:\\winmos11\\samples\\ch4_100_etoh_2.mol2\" -s -
↪lammps "Dreiding" "Minimize (fast):NVT (fast):NPT (fast)" 2
\"C:\\winmos11\\winmostar.exe\" \"C:\\winmos11\\samples\\ch4_100_etoh_2.mol2\" -s -
↪lammpsfile GAFF SPC/E ch4_100_ethoh_2_auto.data
```

初期入力ファイルを第一引数に指定します。
-s 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。Samples\wmjobs.bat を参考にしてください。
-s を除く-から始まるコマンドは指定した順に実行されます。
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。

11.2 CygwinWM

CygwinWM 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 *CygwinWM* **のセットアップ** が必要です。

インストール方法は *CygwinWM* **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、CygwinWM 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 CygwinWM 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** → *CygwinWM* **を診断** 機能を使用することで、CygwinWM 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。）
> - CygwinWM 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* を選択すると、CygwinWM のコンソールを直接起動することが可能です。

11.3 力場に関して

11.3.1 Universal Force Field

Winmostar の分子動力学計算（Gromacs, LAMMPS）で利用できる Universal Force Field（以下、UFF）は次のように実装されています。

まず、OpenBabel の UFF パラメータアサイン機能を利用して、対象となる分子にパラメータをアサインします。その際に、UFF の原著論文 [Rappe1992] に書かれた atom type に相当しない原子については、Coordination を自動で変更して近い atom type がアサインされます。詳細は、OpenBabel のソースコードを参照してください。

UFF の関数形は Gromacs、LAMMPS で使用可能な関数で完全に再現することができません。そのため、OBGMX [Garberoglio2012] の方法で Gromacs および LAMMPS で使用可能な関数向けに係数を変換しています。Improper torsion については、LAMMPS の improper_style fourier を使わず、Gromacs と同じ harmonic 関数（improper_style harmonic）で計算しています。

また、OBGMX の方法では、square planar、octahedral 構造における Angle ポテンシャルで、極小点が 1 か所しかないために適切な安定構造を与えないため、Winmostar では 4 次関数を使用しています。4 次関数の係数は、以下の方針で決定しました。

- 2 か所のポテンシャル極小点の位置（角度、エネルギー）を再現する
- 2 か所のポテンシャル極小点の間にある極大点のエネルギーを再現する
- ただし、LAMMPS の場合は 0 次の係数を設定できないため、エネルギーのみ定数分シフトする（エネルギーの微分である力は Gromacs と LAMMPS で一致するので、実用上の影響はないと思われる）

上記の方針のため、得られる平衡構造と分布は UFF 原著のポテンシャルを使った場合から大きく変化しないと期待されます。なお、広く使われている OpenBabel においても、Angle ポテンシャルに独自のペナルティ関数を追加しており、厳密には UFF 原著のポテンシャルからずれがあります。

Winmostar では square planer, octahedral の Angle の係数を以下のようにしました。 $C_{i,\mathrm{gro}}$ は Gromacs の 4 次関数の係数、 $k_{a,\mathrm{uff}}$ は UFF の係数です。LAMMPS の場合は $C_{2,\mathrm{gro}}$ と $C_{4,\mathrm{gro}}$ だけが使われます。

$$
\begin{aligned}
C_{0,\mathrm{gro}} &= \frac{1}{4}(2-\sqrt{2})k_{a,\mathrm{uff}} \\
C_{1,\mathrm{gro}} &= 0 \\
C_{2,\mathrm{gro}} &= -\frac{8}{\pi^2}(2-\sqrt{2})k_{a,\mathrm{uff}} \\
C_{3,\mathrm{gro}} &= 0 \\
C_{4,\mathrm{gro}} &= \frac{64}{\pi^4}(2-\sqrt{2})k_{a,\mathrm{uff}} \\
\theta_{0,\mathrm{gro}} &= \frac{3}{4}\pi
\end{aligned}
$$

また、Gromacs における Improper torsion angle の計算は粒子のインデックスの順番（jkl）に依存します（LAMMPS は依存しない）。そのため、Winmostar はインデックスの順番を自動調整し、Gromacs と LAMMPS での計算結果が一致するようにしています。（詳細は *Gromacs→LAMMPS* **の力場ファイル変換** ）

11.3.2 Dreiding

Winmostar の分子動力学計算（Gromacs, LAMMPS）で利用できる Dreiding は次のように実装されています。

Improper torsion については、Gromacs で Dreiding の関数が実装されておらず、Gromacs では harmonic (funct=2)、LAMMPS では improper_style umbrella で計算するようにしています。

Winmostar では以下のように係数を変換しています。 $k_{\xi,\mathrm{gro}}$ は Gromacs の係数、 K_{lmp} は LAMMPS の係数です。ポテンシャル極小点におけるテーラー展開の 4 次項以降を無視した形式を採用しています。

$$K_{\mathrm{lmp}} = \frac{1}{2} k_{\xi,\mathrm{gro}}$$

11.4 SDF ファイルの編集

SDF ファイルはマテリアルインフォマティクス、機械学習などに広く用いられているフォーマットです。

11.4.1 SDF ファイルの可視化

ファイルを開く から SDF ファイルを選択して開くと **アニメーション操作エリア** が開き、SDF ファイル内の各構造を順番に確認することができます。

11.4.2 SDF ファイルの編集

1. 上記の方法で SDF を開いた後、 **アニメーション操作エリア** の *Options* → *Export* → *All Frames Separately* を選択すると、各構造を選択したフォルダの中に個別のファイルとして出力することができます。
   - SDF ファイルの各構造に対して結合長の調整、水素の付加、簡易構造最適化を行いたい場合は、 **アニメーション操作エリア** の *Options* → *Auto* → *Check All* をクリックしてから *Options* → *Export* → *All Frames Separately* または *Options* → *Export* → *SDF File* を実行してください。
   - Gaussian の入力ファイル (gjf ファイル) を出力したい場合は、*Options* → *Export* → *All Frames Separately* を実行する前に **キーワード設定** を実行してください。
2. その後、各構造に対応するファイルを **ファイルを開く** または Winmostar にドラッグアンドドロップして開き、編集し、 **上書き保存** から上書き保存します。
3. **複数ファイルを *SDF* 形式に集約** から先ほど出力したフォルダを選択すると、再び SDF ファイルを作成することができます。

11.5 Winmostar の機能検証

Winmostar は、世界中の研究者が使用しているオープンソースソフトウェアを呼び出すことにより、高い品質を維持しています。一方で、Winmostar 独自の実装に強く依存する機能もあり、ここではそのような機能の検証結果を示します。ここに示した検証はリリース前に実行されています。

11.5.1 Gromacs→LAMMPS の力場ファイル変換

Winmostar は、Gromacs 用の top ファイルを変換することで汎用力場を用いた LAMMPS 用の data ファイルを生成しています。この変換機構を用いて Gromacs と LAMMPS を用いて同じ系に対してエネルギーを計算した結果を示します。

表 1: エネルギー各成分の Gromacs, LAMMPS 間相対エネルギー差

力場	Bond	Angle	Dihedral	Improper	Coulomb	Vdw	Total
UFF	2.57E-8	6.965E-9	1.17E-8	2.11E-8	7.21E-8	3.71E-8	7.55E-9
Dreiding	6.32E-9	4.25E-8	7.20E-9	5.37E-8	7.21E-8	3.62E-8	2.47E-8
GAFF	2.82E-8	3.06E-8	1.10E-8	2.97E-9	7.61E-8	9.51E-10	3.62E-9
OPLS-AA/L+GAFF	2.82E-8	3.06E-8	1.10E-8	2.97E-9	7.22E-8	1.67E-8	6.31E-8
OPLS-AA	1.64E-9	2.60E-8	1.10E-8	2.97E-9	7.22E-8	1.67E-8	5.93E-9

詳細な計算条件は以下の通りです。

- ベンゼン 1 分子、AM1-BCC 電荷で計算
- 自由境界条件、カットオフ半径 20 Å、結合長・角度の拘束なし
- Gromacs は 5.0.7 倍精度版、LAMMPS は 2016 年 3 月 9 日版を使用
- Coulomb, Vdw は 1-4 相互作用を含む
- Dreiding の Improper は LAMMPS の improper_style umbrella に相当する関数が Gromacs に実装されていないためどちらも improper harmonic で計算
- Gromacs の 1-4 相互作用スケーリング係数は単精度で内部処理されているため、LAMMPS でも単精度相当の係数を設定
- OPLS-AA では mktop にて生成したファイルを使用

上の表より、すべての成分について 8-10 桁程度 Gromacs と LAMMPS の間でエネルギーが一致していることがわかります。Gromacs と LAMMPS の細かい実装の差（各種関数の近似計算、並列計算など）により厳密に一致させることは困難ですが 8-10 桁程度の一致であれば実用上問題ないと考えられます。

また、同様のテストを、エネルギーの各成分に着目した系、複数分子系などでも実施しています。

11.6 各種パラメータに関して

11.6.1 物理定数

Winmostar で使用している物理定数は、2018 年 CODATA 推奨値 [2018CODATA] です。

11.6.2 原子データ

Winmostar で使用している原子データの引用文献は次の通りです。

共有結合半径 (単結合)	[Cordero2008]
共有結合半径 (多重結合)	[Pyykko2008]
van der Waals 半径 (典型元素)	[Mantina2009]
van der Waals 半径 (遷移金属元素)	[Rahm2016]
原子質量	[NIST966]

なお、 **ヘルプ → ユーザ設定フォルダを開く** の `atoms1.wmx` の 3 列目を編集することで、各元素の表示半径を任意の値に設定することができます。

11.6.3 結合判定基準

単結合判定

2 原子間距離が、それぞれの原子の共有結合半径 (単結合) の和に **結合判定係数** を掛けた値より短い場合、単結合と判定します。例外として、H-H、O-O、F-F 結合は次の表の値 (単位: Å) に **結合判定係数** を掛けて判定します。それぞれ、H_2、HOOH、F_2 を B3LYP/6-31G*で構造最適化計算を行い算出しました。

H-H	0.74
O-O	1.45
F-F	1.40

多重結合判定

一部の 2 原子の組み合わせについて、2 原子間距離が、それぞれの原子の共有結合半径 (多重結合) の和を 1.03 倍した値より短い場合、二重もしくは三重結合と判定します。単結合及び二重結合の平均の和の 1.03 倍より短い場合、1.5 重結合 (芳香族結合) と判定します。例外として、N=N、O=O、P=O 二重結合は次の表の値 (単位: Å) を 1.03 倍して判定します。それぞれ、HNNH、O_2、H_3PO_4 を B3LYP/6-31G*で構造最適化計算を行い算出しました。

N=N	1.246
O=O	1.215
P=O	1.473

判定をしている結合の種類は次の表の通りです。

結合種類	1.5 重結合	二重結合	三重結合
C-C	✓	✓	✓
C-N	✓	✓	✓
C-O		✓	
C-S	✓	✓	
N-N	✓	✓	✓
N-O	✓	✓	
O-O		✓	
P-O		✓	
P-S		✓	
S-O		✓	

Chapter 12

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"ワールドワイド言語サポートで *Unicode UTF-8* を使用"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。
- アニメーション操作エリア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。
- ローカルマシンで *Gromacs* を実行中に *Gromacs* がフリーズする。
- *RISM* 対応版の *Quantum ESPRESSO* 使用時に、メインウィンドウのキーワードが変更されていないにも関わらず変更されたと表示されることがある。
- *Quantum ESPRESSO 6* をベースにした *ESM-RISM* 版 *QE* では正常に処理できた *MOL* ファイルが、*QE 7.1* 使用時に正常に読み込めない。
- *Gromacs* が出力する *Isothermal Compressibility*（等温圧縮率）、*Adiabatic Bulk Modulus*（断熱体積弾性率）の単位が間違っている。
- *Gromacs* のトラジェクトリを読み込んだ構造または、最終構造において、本来繋がっているべき分子がバラバラに表示される。
- *[ファイル]-[インポート]-[SMILES]* で *SMILES* 文字列を読み込んだが、意図通りの構造が読み込まれない。
- *Winmostar* の処理中に *Windows*（エクスプローラ）上で直接作業ディレクトリ、作業フォルダを削除すると *Winmostar* がフリーズする。
- *Winmostar Viewer* でサイズが大きい *cube* ファイルを開けない。
- *Windows* のディスプレイ拡大率が *100* %以外の時に *Winmostar* のツールバー、ツールボタンの表示が崩れる。
- *LAMMPS* でポテンシャルファイルを用いて計算した際に、一部条件下で計算終了後の構造ファイルにおける元素の認識に失敗する。
- *Windows11* でジョブマネージャから *Stop* メニューでジョブを終了できない。

- 力場割り当て機能において同一組成で結合様式の異なる分子が同一分子種に認識される。
- セキュリティ対策ソフトの *McAfee* が稼働していると結晶の対称性検出処理に失敗する。
- *Arm* 系 *CPU* の *PC* において *Gromacs* や溶媒配置機能が正常動作しない。
- *CygwinWM* に同梱されている *Quantum ESPRESSO* 用の一部の擬ポテンシャルファイルにおいて、ファイル名が *PAW* であることを示すにもかかわらず内容として *USPP* である。

12.1 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)

12.2 Windows の"ワールドワイド言語サポートで Unicode UTF-8 を使用" 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。

Windows 10 において、[コントロールパネル]-[時計と地域]-[日付、時刻、数値形式の変更]-[管理]-[システムロケールの変更]-[ワールドワイド言語サポートで Unicode UTF-8 を使用] にチェックが入っていると、各種リモートジョブの実行、LAMMPS の実行、FDMNES の実行に失敗するという報告がありました。ファイルが 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)

12.3 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)

12.4 アニメーション操作エリア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)

12.5 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）

12.6 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リモートジョブ投入機能をお使いください。また、Winmostar では Gromacs と似た操作方法で LAMMPS を使用できますので、LAMMPS をお使い頂くという選択肢もございます。（2020 年 12 月 4 日報告）

12.7 RISM 対応版の Quantum ESPRESSO 使用時に、メインウィンドウのキーワードが変更されていないにも関わらず変更されたと表示されることがある。

constant-mu 計算時（lfcpopt = .True.）に、fcp_mu の値が更新されたと誤判定されます。実際には値が変更されるわけではないため、そのまま使用しても問題ありません。（2019 年 6 月 2 日報告）

12.8 Quantum ESPRESSO 6 をベースにした ESM-RISM 版 QE では正常に処理できた MOL ファイルが、QE 7.1 使用時に正常に読み込めない。

MOL_INFO などのタグ中の文字列に&（アンパサンド）が含まれているとこの現象が起きます（付属の H2O.tip5p.MOL など）。アンパサンドを削除することで正常に処理できるようになります。（2025 年 1 月 29 日報告）

12.9 Gromacs が出力する Isothermal Compressibility（等温圧縮率）、Adiabatic Bulk Modulus（断熱体積弾性率）の単位が間違っている。

Gromacs5.0.7 の gmx energy のログに、Isothermal Compressibility の単位が「J/m^3」と書かれていますが、正しくは「m^3/J」です。同様に、Adiabatic Bulk Modulus の単位は正しくは「J/m^3」です。（2020 年 6 月 29 日報告）Gromacs2024.4 ではこの不具合は解消されています（2025 年 11 月 21 日報告）。

12.10 Gromacs のトラジェクトリを読み込んだ構造または、最終構造において、本来繋がっているべき分子がバラバラに表示される。

Gromacs 本体の不具合に由来しています。長時間の計算ほど発生する可能性が高くなります。ただし、周期境界を考慮すると正しい原子配置となっているため、その MD 計算自体に問題はありません。特に界面ビルダで 2 つの系を接合するときなどに問題が生じます。バラバラになった分子を元に戻す場合は、2 つあります。1 つ目の方法は、[MD]-[Gromacs]-[力場を割り当て] から [トポロジファイルに書かれたパラメータを使用] を選択し、対象とするデータの top ファイルを選択します。2 つ目の方法では、まず [編集]-[周期境界条件に基づき原子を再配置] において、[セルの内側に原子単位で再配置] をクリック →[適用] ボタンをクリック →[原子単位で再配置された構造を元に戻す] をクリック →[適用] ボタンをクリック →[OK] ボタンをクリックとしてください。ただし、計算した時と同じセルでこの操作を行う必要があるため、界面ビルダなどを使用する前に実行してください。（2020 年 12 月 25 日報告）

12.11 [ファイル]-[インポート]-[SMILES] で SMILES 文字列を読み込んだが、意図通りの構造が読み込まれない。

SMILES を読み込むプログラムは世の中に何種類かあり、それぞれ若干の実装の違いにより生成される分子が変化してしまいます。Winmostar では SMILES の読み込みに OpenBabel または Balloon を使用しており、[Import SMILES] ウィンドウにおいて実際にどちらを使うか選択することができます。

例えば OpenBabel では"C[C@@H]1CCCC[C@@H]1C"（本来なら cis-1,2-Dimethylcyclohexane）が trans-1,2-Dimethylcyclohexane として認識されました。（2020 年 1 月 29 日報告）

12.12 Winmostar の処理中に Windows（エクスプローラ）上で直接作業ディレクトリ、作業フォルダを削除すると Winmostar がフリーズする。

処理が終了している時または Winmostar が終了している時に削除してください。（2021 年 12 月 24 日報告）

ヒント：作業フォルダ

- 作業フォルダとは、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、作業フォルダの名前は `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フォルダ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フォルダ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、作業フォルダが `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。**

12.13 Winmostar Viewer でサイズが大きい cube ファイルを開けない。

VESTA や VMD など他の cube ファイル可視化ソフトをご利用ください。なお Winmostar の [ツール]-[環境設定]-[基本]-[Cube ファイルの表示に外部ビューワを使用] にチェックを入れ、[プログラムパス]-[Cube Viewer] に cube ファイル可視化ソフトを指定することで、Winmostar Viewer の代わりにそれらのソフトを直接起動することができます。(2022 年 10 月 21 日報告)

12.14 Windows のディスプレイ拡大率が 100 %以外の時に Winmostar のツールバー、ツールボタンの表示が崩れる。

100 %に変更して使用してください。Windows10 では、設定 → システム → ディスプレイ → 拡大縮小とレイアウト、から変更できます。ディスプレイの表示が小さくて文字が読みにくい場合は、画面解像度を落としてください。(なお、Windows の当該機能は Winmostar 以外の様々なアプリケーションでも問題となっています。)(2022 年 10 月 28 日報告)

12.15 LAMMPS でポテンシャルファイルを用いて計算した際に、一部条件下で計算終了後の構造ファイルにおける元素の認識に失敗する。

例えば Sn 結晶に対し NIST リポジトリで入手できる MEAM ポテンシャルで計算すると、write_restart コマンドで出力するファイルにおいて質量が「118.7107」であるべきところ「118」と出力されます。Winmostar では質量の値から元素を認識しており、認識できない場合 CGA などの粗視化原子として判定します。これは LAMMPS の不具合ですので (少なくとも 20160309 版で確認)、最終構造の data ファイルにおいて Masses セクションの質量をテキストエディタ等で修正してください。(2022 年 12 月 8 日報告)

12.16 Windows11 でジョブマネージャから Stop メニューでジョブを終了できない。

計算ウィンドウを閉じるかタスクマネージャ等でプロセスを終了させてください。NWChem の場合、ジョブマネージャの CPU 使用率が多くなり終了もできなくなるという症状も一部報告されています。(2023 年 5 月 20 日報告)

12.17 力場割り当て機能において同一組成で結合様式の異なる分子が同一分子種に認識される。

Winmostar V11.2.0 において修正されています。Winmostar V10 以前をお使いの方は Winmostar V11 にアップグレードしてください。

12.18 セキュリティ対策ソフトの McAfee が稼働していると結晶の対称性検出処理に失敗する。

セキュリティ対策ソフトの McAfree が稼働していると、スラブ作成機能や Quantum ESPRESSO, OpenMX, VASP, AkaiKKR などのワークフロー設定・キーワード設定機能の起動時に実行される対称性検出処理に失敗することがあります。findprim_spglib.exe という内部モジュールが自動で削除されることが原因である場合があります。その場合は、McAfee の動作を停止（あるいは一時停止）することで正常に処理が実行されます。(2025 年 2 月 27 日報告)

12.19 Arm 系 CPU の PC において Gromacs や溶媒配置機能が正常動作しない。

2025 年 11 月時点では少なくとも CygwinWM が Arm 系 CPU において正常動作しないことが確認されていました。その後、正常動作する組み合わせは見つけられています。詳細は **最小・推奨スペック** でご確認ください。(2025 年 12 月 17 日報告)

12.20 CygwinWM に同梱されている Quantum ESPRESSO 用の一部の擬ポテンシャルファイルにおいて、ファイル名が PAW であることを示すにもかかわらず内容として USPP である。

CygwinWM に同梱されている Quantum ESPRESSO 用の擬ポテンシャルファイル, B.pbe-n-kjpaw_psl.0.1.UPF, B.pbesol-n-kjpaw_psl.0.1.UPF, B.rel-pbe-n-kjpaw_psl.0.1.UPF, B.rel-pbesol-n-kjpaw_psl.0.1.UPF は、ファイル名が PAW であることを示すにもかかわらず USPP の擬ポテンシャルファイルとなっています。それらのファイルの取得元である Quantum ESPRESSO の公式ウェブにおいても同様です。Winmostar V11.18.1 以降では、ファイル名に kjpaw を含む擬ポテンシャルファイルが PAW 型ではない場合に警告を出すようにしました。(2026 年 10 月 19 日報告)

Chapter 13

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。
  - *Q. Winmostar* 本体と保守の価格を分割することは可能ですか？保守のみの販売はありますか？
  - *Q.* 製品の保証書はありますか？
  - *Q.* 個人利用での割引などありますか？個人向けライセンスはありますか？
  - *Q.* 教育機関と研究機関を兼任していますが、研究機関の予算で教育機関向けライセンスを購入できますか*?*
  - *Q.* 代理店からサイトライセンスを購入する際にサイトライセンス契約書はどのような流れで締結しますか*?*
  - *Q.* 日割りあるいは月割りでの購入は可能ですか？
  - *Q.* なぜ *Winmostar* は他社の同等な *GUI* ソフトウェアの製品よりコストパフォーマンスが良いのですか*?*
  - *Q.* 取引においてお客様側が準備するシステムの利用を求める際に発生する事務手数料を免除することは可能ですか？
  - *Q.* 取引においてどのようなシステムを使う場合に追加の事務手数料は発生しますか？
  - *Q.* 取引において電子契約システムを使う場合、追加の事務手数料は発生しますか？
  - *Q.* 日本向けとその他の国向けで価格が違うのはなぜですか？
  - *Q.* 日本国外（海外）から、日本国内向けの価格で購入することはできますか？
  - *Q.* 日本国外（海外）のお客様向けの見積書や請求書は、どこが発行しますか？
- ライセンス・ライセンスコードに関して
  - *Q.* 特定ユーザライセンスの登録ユーザ変更は可能ですか？
  - *Q.* 教育機関向けライセンスを購入した時の所属機関から他の機関に移った場合、そのライセンスを使い続けることは可能ですか？

  - *Q.* 無償版、学生版、無料トライアルからプロフェッショナル版といった具合に、途中から製品を購入するなどしてエディションを変更する際に再インストールは必要ですか？
  - *Q.* 無償版とプロフェッショナル版、といった具合に異なるエディションの *Winmostar* を複数インストールすることは可能ですか？
  - *Q.* すでに入力したライセンスコードを変更する方法を教えてください。
  - *Q. MAC* アドレスを表示する方法を教えてください。
  - *Q. Winmostar* のライセンス料に、*Gaussian, VASP* のライセンス料は含まれていますか？ *Gaussian, VASP* のライセンスが付属した *Winmostar* のラインナップはありますか？
  - *Q.* ライセンス期限が来るとそれまで使用していた *Winmostar* はどうなりますか？
  - *Q.* 個人での学習目的に教育機関向けライセンスを購入できますか？
  - *Q.* ライセンスの更新の手順を教えてください。
  - *Q.* 指導学生が利用予定の学生版を教員が事前に評価したい場合はどうしたらいいですか？
  - *Q.* プロフェッショナル版（トライアル）の利用期限を過ぎると何が起きますか？料金が発生しますか？
- サポート・保守に関して
  - *Q.* 保守の内容は何ですか？
  - *Q.* 質問がある場合、担当者に直接メールで問い合わせできますか？
  - *Q.* 有償のメールサポート（メールでの操作方法サポート）と無償のお問い合わせフォームからの質問の違いを教えてください。
  - *Q.* 不具合サポートやパッチ提供は受けられますか*?*
  - *Q.* 旧バージョンのサポート・保守はどこまで行われますか*?*
  - *Q. Winmostar* の開発元（製造元）はどこですか？製造地はどこですか？
  - *Q.* 開発元（製造元）と直接連絡取ることはできますか*?*
  - *Q.* 使用している *Winmostar* のアップデート・バージョンアップ・アップグレードは可能ですか*?*
  - *Q.* 質問するときの注意事項はありますか？
  - *Q.* 保守のみの販売はありますか？
  - *Q.* 永久使用権の年間保守が切れた場合何が起きますか？
  - *Q.* 各種ソルバの技術サポートは提供していますか？各種ソルバの技術サポートを受けるにはどうしたらいいですか？
  - *Q.* 電話やオンラインミーティングを用いたサポートは行っていますか？
- ソフトウェアの機能・利用について
  - *Q.* 「*Winmostar*」の呼び方は何ですか？
  - *Q. Winmostar* は社内外のサーバやクラウドに接続しますか*?LAN* 接続していない状態でも利用可能ですか*?*
  - *Q. Winmostar* を動かす *PC* の最小・推奨スペックを教えてください。
  - *Q. Winmostar* で作成したデータ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. Winmostar* の画面を撮影した動画・画像を *YouTube*、*SNS* などのウェブ媒体にアップロードすることは可能ですか？
  - *Q. Winmostar* そのものに各種計算用ソフトがインストールされていますか？
  - *Q. Winmostar* はクラウド上で計算させていますか？
  - *Q. Winmostar* は *GPU* 計算に対応していますか？
  - *Q. Intel* と *AMD* のどちらの *CPU* の方が動作に適していますか？どちらがお勧めですか？
  - *Q. Winmostar* を使って並列計算は可能ですか？
  - *Q. Winmostar* を使って並列計算する際、利用できるコア数の上限はありますか？利用できるコア数に応じて費用は変わりますか？
  - *Q. Winmostar* は *macOS*、*Linux* で動作しますか？
  - *Q. Winmostar* は *Arm* 系 *CPU* で動作しますか？
  - *Q. Gaussian* のインストール方法を教えてください。
  - *Q. VASP* のインストール方法を教えてください。
  - *Q. CygwinWM* のインストーラを起動しようとすると *Windows* あるいはエクスプローラがフリーズします。どうしたらいいですか？
  - *Q. Winmostar* で何原子あるいは何分子まで計算できますか？扱える原子数、分子数の上限はありますか？
  - *Q. Winmostar* で粗視化モデルの計算はできますか？
  - *Q.* 安定版最新バージョンと開発版最新バージョンの違いは何ですか？どちらがお勧めですか？
  - *Q. Winmostar* を使用して得られた計算結果・出力ファイルの権利は誰に帰属されますか？

- ソフトウェア動作全般に関して
  - *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.* インストールテストは正常終了しますが、プロジェクトモードのジョブが常に失敗します。どうしたらいいですか？
  - *Q.* 「*ERROR: I/O error 32*」と表示され処理に失敗します。
  - *Q. Cygwin* を使う処理が異常終了します。／ツール → CygwinWM 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 → CygwinWM を診断 機能で No reference file (... filelist_cygwinwm.txt) was found... と表示されます。
  - *Q.* ツール → CygwinWM を診断 機能で WARNING ... some files are missing と表示されます。
  - *Q.* ツール → CygwinWM を診断 機能で ERROR ... Failed to generate a current file list と表示されます。
  - *Q.* ツール → CygwinWM を診断 機能で ERROR: Getting SMILES ... と表示されます。*OpenBabel* の処理が異常終了します。
  - *Q.* ジョブマネージャに登録されたジョブが実行されません。
  - *Q.* ジョブマネージャでジョブを停止しても、表示上 *ABORT* になりますが、ジョブのプロセスが続いたままです。

  - *Q.* ジョブの実行時に「実行できません（アクセスが拒否されました。）」と表示アラートが出現しジョブが開始されません。
  - *Q. Winmostar* の各種機能やソルバーの実行など、黒いコンソール画面が出現する機能において、黒いコンソール画面の処理が終わらず先に進みません。
  - *Q.* ファイルを開いたり、分子をモデリングした際に、結合が出現しなくなってしまった。または、無駄に結合が多く出現するようになってしまった。
  - *Q. Windows* のエクスプローラ上で拡張子を表示するにはどうしたらいいですか？
  - *Q.* マーカー（赤丸）やグループ選択（青丸）が表示されなくなりました。原子を選択できなくなりました。
  - *Q.* ツールバー、ツールボタンの表示が崩れました。直すことはできますか？
  - *Q.* 最適化フラグとは何ですか？
  - *Q. Winmostar* から直接計算を実行せず、ファイルだけを保存させることはできますか*?Winmostar* が生成するファイルを編集してからジョブを流すことはできますか*?*
  - *Q.* 各ソルバの最新バージョンあるいは *Winmostar* の動作環境に記載のないバージョンを、*Winmostar* から利用することは可能ですか*?*
  - *Q.* ウィンドウをリサイズすると分子表示エリアの表示が崩れます。どうしたら解消しますか？

- ファイル入出力に関して
  - *Q. Winmostar* 以外で生成されたファイルを *Winmostar* で開けません。また、*Winmostar* で生成したファイルを編集してから *Winmostar* で開こうとしても開けません。
  - *Q. MOL* 形式または *SDF* 形式のファイルを開くと、結合長が不自然になります。水素が出現しません。
  - *Q. SMILES* を読み込んでも意図通りの構造が生成されません。なぜですか？どうしたらいいですか？

- 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。
  - *Q.* 一部の機能を実行したときに \357\273\277 などと表示され処理に失敗します。
  - *Q. AM1-BCC* 電荷を計算できない場合はどうしたらいいですか？

- ローカルマシンでの *MPI*・並列実行に関して
  - *Q.* 自分で流す並列計算が異常終了するのはなぜですか？インストールテストの並列テストには成功します。並列なしの計算も正常終了します。
  - *Q. MPICH* が計算途中で終了します。
  - *Q. Quantum ESPRESSO, LAMMPS* 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。
  - *Q. dotNetFx35setup.exe* を用いた*.NET Framework 3.5* のインストールに失敗します。どのようにしたらいいですか？
  - *Q.* 並列数の欄をプルダウンしても、設定したい並列数が見つかりません。どのようにしたら設定したい並列数に設定することができますか？

  - *Q.* ローカルジョブにおいて、複数のジョブを同時ではなく逐次実行するにはどうしたらいいですか？
- 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.* 各種のターミナルソフトでは *SSH* 接続できるサーバに *Winmostar* から接続できません。
  - *Q.* 公開鍵方式の *SSH* 接続に失敗します。*TeraTerm* や *Cygwin* など他のソフトで同じ秘密鍵ファイルを指定すると接続に成功します。解決法はありますか？
  - *Q.* Test Connection での接続テストは成功するが、ジョブの投入 *(*サブミット*)* に失敗します。
  - *Q.* Test Connection での接続テストは成功するが、*Putty* の *WARNING* が表示され各種の操作に失敗します。
  - *Q.* リモートサーバではどの種類の *MPI*（*MPICH*、*OpenMPI* など）を使用できますか？
  - *Q.* リモートサーバで *bashrc* などに記入して設定しているはずの環境変数（*PATH* など）が、*Winmostar* から実行した時に設定されないことがあるのはなぜですか？そのような場合はどうしたらいいですか？
  - *Q. Windows* 版のソルバと *Linux* 版のソルバの間で動作に違いはありますか？
  - *Q.* 異なるサーバ上で流すリモートジョブを計算を同時に実行することはできますか？
  - *Q.* リモートジョブのプロファイルで記入したパスワードはどこに保存されますか？プロジェクトフォルダにパスワードの情報は保存されますか？
  - *Q. WSL2* 利用を含めた *Ubuntu* マシンへ *SSH* 接続はできるにもかかわらず、リモートジョブ実行が正常に行えないのはなぜですか？
  - *Q. FOCUS* スパコンなど外部のリモートサーバで急にジョブ投入が失敗するようになりました。
  - *Q. FOCUS* スパコンなど外部のリモートサーバ上のファイルを削除したい。
- シミュレーション全般に関して
  - *Q.* ある物質とある物質の間の相互作用を計算することは *Winmostar* で可能ですか？
  - *Q.* 分子内のある結合に関する結合エネルギーや結合解離エネルギーを計算することはできますか？
- *MOPAC, CNDO/S, GAMESS, NWChem, Gaussian* に関して
  - *Q.* 量子化学計算の実行中にエラーが起こるがどうしたらいいですか。
  - *Q. MOPAC*、*GAMESS*、*Gaussian*、*NWChem* のキーワード設定ウィンドウや *Easy Setup* ウィンドウで、使用したい計算手法（*Hamiltonian*）、基底関数（*Basis Set*）が選択肢の中に見つかりません。どのように設定したらいいですか？
  - *Q.* 入出力ファイルを開くときや結合を再生成する際に、結合はどのように判定されますか？
  - *Q.* 系のモデリング中や、計算結果を読み込んだ際に、不要な結合が表示されます。または結合が表示されません。どのように対処したらいいですか？
  - *Q. Winmostar* から量子化学計算を用いて部分構造の最適化は可能ですか？
  - *Q. Winmostar* 分子表示エリア下部に表示される *Dipole moment* の値と、*Mulliken* 電荷などの各原子に割り当てられた電荷から手動で算出した双極子モーメントの値が異なるのはなぜですか？
  - *Q. MOPAC* で計算できる最大原子数はいくつですか？
  - *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. Winmostar* に付属の *MOPAC* で溶媒効果（*COSMO* 法）を使用するにはどうしたらいいでしょうか。
- *Q. Winmostar* 内蔵以外の *MOPAC(MOPAC2016* など*)* で計算すると、一部の分子軌道しか表示されません。
- *Q. CNDO/S* で *Method=INDO* を使用したときに計算できません。
- *Q. GAMESS, Gaussian, NWChem* で計算可能な最大原子数（必要メモリ）の目安はありますか？
- *Q. GAMESS, Gaussian, NWChem* の *ESP*（静電ポテンシャル）の *3* 次元表示を高速化することはできますか？
- *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. Windows* 版 *GAMESS* をインストールした直後は問題なく利用できていたが、ある時期から計算が全て途中で異常終了するようになりました。対処方法はありますか？
- *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. GAMESS* の実行時に「*ERROR: BAD DELOCALIZED COORDINATES GENERATED!!!*」、「*THERE ARE NOT ENOUGH PRIMITIVE INTERNAL COORDINATES*」とログに出力され計算が異常終了します。
- *Q. GAMESS* で *NMR* 計算を実行しようとする（*RUNTYP=NMR* で計算をする）とエラーが出ます。
- *Q. GAMESS* で *Diffuse* 関数を使うと *SCF* 計算が収束しません。
- *Q.* 一部の分子において、*Firefly* の *optimaize* 実行後、分子軌道 *UVvis*…を確認すると、「*'*******' is not valid floating point value*」というエラーがでます。
- *Q. GAMESS* で構造最適化計算を実行し「*THE GEOMETRY SEARCH IS NOT CONVERGED!*」というメッセージが出た際の対処方法を教えてください。
- *Q. GAMESS* のインストーラをダウンロードできません。どのようにしたらいいですか？
- *Q. GAMESS* の *DFT* 計算で「*CONVERGED TO SWOFF, SO DFT CALCULATION IS NOW SWITCHED ON*」の表示の後、収束しません。対処方法はありますか？
- *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. NWChem* の実行時に「*sym_geom_project: sym_center_map is inconsistent with requested accuracy*」とログに出力され計算が流れません。
- *Q. NWChem* で溶媒効果を入れる方法を教えてください。
- *Q. NWChem* の実行時に「*out of memory*」、「*alloc failed*」「*ma_push failed*」、「*nga_create failed*」、「*Global memory limit unreasonable*」を含む行がログに出力され計算が流れません。
- *Q. Gaussian* で計算が正常に実行される時とされない時があります。

  - *Q. Gaussian* の *log* ファイルを読み込んだのですが、軌道 *(*固有*)* エネルギーなどが表示されません。
  - *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。
  - *Q.* 数 *GB* の *Gaussian fchk* ファイルを読み込ませて分子軌道を表示させようとするとエラーが出ます。
  - *Q. Gaussian* で同位体効果を考慮した振動計算を行う方法を教えてください。
  - *Q. GAMESS* の構造最適化計算実行時に「*OPTIMIZATION ABORTED. -- GRADIENT OUT OF RANGE -- MAXIMUM ALLOWED FORCE (FMAXT)* 」とログに出力されて異常終了します。
  - *Q. GAMESS*、*NWChem* で構造最適化後に計算した振動（*IR*、ラマン）スペクトルの初めのほぼ *0cm* $^{-1}$ の *6* つのモードは何ですか？
  - *Q. Gaussian* で開殻 *1* 重項の計算を行うにはどうしたらいいですか。
  - *Q. Gaussian*、*GAMESS*、*NWChem* で同じ *DFT* 汎関数と基底関数を使っても、エネルギーが *0.001 Hartree* オーダーで異なることがあるのはなぜですか。
  - *Q. Gaussian*、*GAMESS*、*NWChem* で同じ *DFT* 汎関数と基底関数を使っても、エネルギーが *0.001 Hartree* オーダーよりも大きな桁で異なることがあるのはなぜですか。
  - *Q.* 遷移状態構造最適化計算を行った後の *IR* 計算で、複数の虚 *(*表示上は負*)* の振動モードが出た場合の対処方法はありますか。
  - *Q. GAMESS* において、「*ILLEGAL EXTENDED BASIS FUNCTION REQUESTED.*」と出力されて、異常終了します。
  - *Q. Gaussian*、*GAMESS*、*NWChem* の *B3LYP* は異なりますか。
  - *Q. GAMESS* と *Gaussian* のプロジェクトモードで *SCF* 計算のリスタートはどうすればいいですか。

- *LAMMPS, Gromacs* に関して
  - *Q.* これから分子動力学計算を実施してみたいのですが *LAMMPS* と *Gromacs* のどちらを使ったら良いですか？
  - *Q.* 分子動力学計算の実行中にエラーが起こるがどうしたらいいですか。
  - *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. MD* 計算を同じ初期配置からの実行したが異なる計算結果が得られました。なぜですか？
  - *Q. NPT* 計算で最終的に得られる密度が実験値などから予測される密度よりもかなり低くなります。どうしたらよいですか？
  - *Q.* 同じ温度・圧力条件の実験で観測されている相（気相、液相、固相など）とは異なる相が出現しました。なぜですか？
  - *Q. MD* 計算において *SHAKE* 法などによる拘束は計算結果にどのような影響を与えますか？拘束方法はどのように選んだらよいですか？
  - *Q. MD* 計算を実行後、アニメーションを観たり、最終構造を見ていると、分子がセルの外側に出てしまうことがあるのはなぜですか？
  - *Q.* タンパク質のような大規模な分子に *[*溶媒を配置*/*セルを構築*]* メニューでセルから水分子を追加してセルを作成するとセルから分子がはみ出ることがあります。
  - *Q. [MD]-[*溶媒を配置*/*セルを構築*]* や *[*分子の挿入*]* の処理が何分経っても終わりません。解決方法はありますか？

  - *Q. [MD]-[*自動で電荷を割り当て*]* メニューで「*Topology file not found*」というエラーが表示されます。解決方法はありますか？
  - *Q.* 力場を割り当てで処理に時間が掛かり終わりません。解決方法はありますか？
  - *Q.* 力場を割り当てでエラーが表示されます。解決方法はありますか？
  - *Q.* ポリマーに点電荷を割り当てるにはどうしたらいいですか？
  - *Q. Gromacs, LAMMPS*（分子動力学計算）から誘電率を計算できますか？
  - *Q.* 界面ビルダで作成した構造から *MD* 計算を実行しようとすると、力場の割り当てが失敗したり *MD* 計算破綻します。解決方法はありますか？
  - *Q.* 圧力制御（*NPT* 一定または *NPH* 一定）を行うと、計算が途中で破綻します。解決方法はありますか？
  - *Q. LAMMPS, Gromacs* で液体（有機物）-固体（無機物）間の相互作用パラメータをどのように決めたらいいですか？
  - *Q. Gromacs* を実行すると「*There is no domain decomposition for 49 ranks that is compatible with the given box and a minimum cell size of...*」というエラーが出ます。どのように対処したらいいですか？
  - *Q. Gromacs* の最終構造やアニメーションを読み込んで取得した構造や、それに何かしらの編集を行ってから再び *MD* 計算を実行すると力場の割り当てが失敗したり *MD* 計算が破綻します。解決方法はありますか？
  - *Q. Gromacs* において最終構造やアニメーションを読み込むと分子がバラバラに表示されることがありますがなぜですか？
  - *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。
  - *Q. LAMMPS* のログに「*Out of range atoms - cannot compute PPPM*」というエラーメッセージが出力され計算が異常終了します。対処方法を教えてください。
  - *Q.* 特定原子の軌跡をプロットする方法を教えてください。
  - *Q.* 散逸粒子動力学（*DPD*）計算で直観的とは異なる結果が得られました。なぜでしょうか。
- *Quantum ESPRESSO, OpenMX* に関して
  - *Q.* 手順通り *Quantum ESPRESSO* の擬ポテンシャルファイルをインストールしたが認識されません。
  - *Q. Quantum ESPRESSO* の擬ポテンシャルファイルの探し方が分かりません。どのように探したらいいですか？
  - *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* を用いて *Phonon* 計算を実行する際に、*ph.x* の出力 *(ph.out)* に「*third order derivatives not implemented with GGA*」と表示され計算結果を取得できません。
  - *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* で、電子密度、スピン密度、ポテンシャルの *3* 次元分布を可視化できません。
  - *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* の *SCF* 計算が出力ファイル（*.pwout* または *.out*）に「*fixed occupations and lsda need tot_magnetization*」と表示され異常終了します。どのように解決したらいいですか？

- *Q. Quantum ESPRESSO* の構造最適化計算（*vc-relax*）が出力ファイル（*.pwout* または *.out*）に「*smooth g-vectors missing !*」と表示され異常終了します。どのように解決したらいいですか？
- *Q. Quantum ESPRESSO* の *SCF* 計算が出力ファイル（*.pwout* または *.out*）に「*charge is wrong*」と表示され異常終了します。どのように解決したらいいですか？
- *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* 計算に失敗し、計算結果を取得できません。
- *Q.* 計算したい元素に対して、*Quantum ESPRESSO* 向けのノルム保存かつ *LDA* 汎関数擬ポテンシャルファイルがデフォルトでインストールされる擬ポテンシャルファイルの中からみつかりません。どのように探したらよいですか？
- *Q.* フェルミ面を出力しようとしてもそれらしきものが表示されません。
- *Q. Quantum ESPRESSO*（バンド計算）から誘電率を計算できますか？
- *Q. Quantum ESPRESSO* で汎関数の種類はどのように設定しますか？
- *Q. Quantum ESPRESSO* でセルサイズの構造最適化を行うと最終構造のエネルギーで不連続的な変化をしたりエネルギーが増加するのはなぜですか？
- *Q. Quantum ESPRESSO* が原子数の少ない系では正常終了しますが大きい系では「*cannot allocate ...*」などのエラーとともに異常終了します。どんな対処法がありますか*?*
- *Q. Quantum ESPRESSO* で *Projected DOS(PDOS)* に出現する *Total DOS* と *Density of States(DOS)* に出現する *DOS* の値が異なるのはなぜですか？
- *Q. Quantum ESPRESSO* で *Hubbard U* を設定して構造最適化すると「*NR-step length unreasonably short*」というエラーメッセージとともに異常終了します。どのような対処法がありますか？
- *Q. Quantum ESPRESSO 6.6* 以前と以降で *SCF* 計算の収束に掛かるサイクル数が大きく変化しますがなぜですか？
- *Q. Quantum ESPRESSO* でハイブリッド汎関数 *(HSE* など*)* を使うとバンド構造が崩れます。対処方法はありますか？
- *Q. QuantumESPRESSO* にてハイブリッド汎関数 *(HSE* など*)* を使うと *DOS* の表示が崩れたり、バンドギャップが文献値よりも過大になってしまいます。対処法はありますか。
- *Q.* 系のモデリング中や、計算結果を読み込んだ際に、不要な結合が表示されます。または結合が表示されません。どのように対処したらいいですか？
- *Q. Quantum ESPRESSO* のワークフロー設定やキーワード設定をする際にプリミティブセルに変換しなくても、計算実行時にプリミティブセルに変換されてしまいます。
- *Q.* 第一原理計算（*Quantum ESPRESSO* など）において、量子化学計算（*GAMESS, Gaussian* など）のような計算から得られた振動スペクトル（*IR*、ラマン）を実験値に合わせるようなスケーリングファクターは提案されていますか？
- *Q. OpenMX* で *MPI* を有効にしてローカルマシンで計算を実行すると、 *tcp_peer_send_blocking: send() to socket 12 failed: Transport endpoint is not connected* というエラーが表示されます。
- *Q. OpenMX* でセルサイズの変化を伴う構造最適化計算を実行した後、*SCF.Restart=On* を設定して継続ジョブを実行すると、標準出力に *Failed (3) in reading the restart files, <Restart> Could not find restart files* と表示されます。

- アドオンに関して

- *Q.* 溶解度パラメータ計算モジュールを用いてポリマーのハンセン溶解度パラメータを計算する際に、ポリマーの繰り返し構造（モノマー）の取り方の違いで出力される値が変化してしまう。
- *Q.* 溶解度パラメータ計算モジュールを用いて取得したハンセン溶解度パラメータの値が、文献値と大きく異なります。

13.1 購入に関して

13.1.1 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。

13.1.2 Q. 当社から発行される書類の種類を教えてください。

A.
請求書・納品書・見積書を発行いたします。
ただし PayPal の場合のみ、PayPal から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もありますのでご了承ください。

13.1.3 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.
詳細は 価格・購入 をご確認ください。

13.1.4 Q. Winmostar 本体と保守の価格を分割することは可能ですか？保守のみの販売はありますか？

A.
分割することはできません。ただし V11 以降の教育機関向けラインナップに限り、V11 本体購入後保守が切れた場合、保守のみ購入することができます。

13.1.5 Q. 製品の保証書はありますか？

A.
保証書という形での書類はありませんが、ご購入時にご同意いただく 使用規約 と サポートサービス規約 に保守等の保証書の内容に相当する文章が書かれておりますので、使用規約とサポートサービス規約を保証書の代用としてご利用ください。

13.1.6 Q. 個人利用での割引などありますか？個人向けライセンスはありますか？

A.
特にありません。無償版については、個人でもご利用頂けます。プロフェッショナル版については、教育機関に所属し教育機関での用務に使用する目的であれば教育機関向け、それ以外であれば民間企業・官公庁向けのライセンスのご購入ください。

13.1.7 Q. 教育機関と研究機関を兼任していますが、研究機関の予算で教育機関向けライセンスを購入できますか?

A.
できません。購入する組織が研究機関の場合は民間企業・官公庁向けライセンスの購入が必要です。

13.1.8 Q. 代理店からサイトライセンスを購入する際にサイトライセンス契約書はどのような流れで締結しますか?

A.
直販と同様に弊社とお客様（エンドユーザ）との間でサイトライセンス契約書を締結させていただきます。

13.1.9 Q. 日割りあるいは月割りでの購入は可能ですか？

A.
サイトライセンスの初年度のみ可能です。例えば、予算の都合などにより、特定ユーザライセンス、ノードロックライセンスで年度末までしか動作しないライセンスが必要な場合、値引きはありませんがライセンス開始日から 1 年以内で希望する日までのみ動作するライセンスを発行することは可能です。

13.1.10 Q. なぜ Winmostar は他社の同等な GUI ソフトウェアの製品よりコストパフォーマンスが良いのですか?

A.
いくつかの理由があります。
まずは、シミュレーションそのものを実行するプログラム（ソルバ）を自社開発せず、世界中で十分に利用実績のあるオープンソースソフトウェアを採用している点にあります。ただし、Winmostar サポートチームはそれぞれのソルバにソースコード・アルゴリズムレベルで精通しているので、サポートも十分に行うことが可能です。必要に応じてソルバの改良・修正も行うことができるのでソフトウェアのクオリティについて安心してお使いいただくことができます。
次に、ソフトウェアのライセンスとサポートに掛かる料金を分けて、ユーザが必要なサポートの量に応じて料金を節約できるようにしている点が挙げられます。多くの類似製品においては、サポート料金もライセンス料

に含める一方で、サポートのクオリティについてはベストエフォートで提供される（つまり保証なし）ことが多いです。
また、Winmostar が純国産ソフトウェアである点も挙げられます。日本国内では為替の影響を受けることなくご利用いただけます。
コストパフォーマンスが良いとクオリティが心配になることがありますが、Winmostar は 20 年以上かけて開発・サポートされその経験を製品・サービスに逐次反映しているので、機能、ドキュメンテーション（マニュアル）の量とクオリティ、不具合対策・品質管理、初心者への対応についても高価格帯製品に引けを取っていません。

13.1.11 Q. 取引においてお客様側が準備するシステムの利用を求める際に発生する事務手数料を免除することは可能ですか？

A.
例外なく免除には応じません。理由は次の通りです。まずは、Winmostar の価格が、弊社の発行する伝票での取引による販売事務を前提とした価格であるためです。お客様側が準備するシステムを利用する際には、見積もり提出、発注、請求処理だけでなく、操作手順書の読み込み、利用者の登録作業、定期的なアカウント情報の更新、システムの仕様変更に伴う操作方法の再習得、といった作業が弊社側で発生します。また、システムの利用で問題が生じたときには、システムの担当者にすぐに直接連絡を取れないケースもあります。システムから、エンドユーザ情報が全く見えない場合もあり、エンドユーザの確認作業が発生することもあります。双方で合意をとれていない注文内容で一方的にシステム上で発注処理が来ることもあり、そのキャンセル作業を行う場合もあります。これらすべてをシステムの利用を求められるお客様ごとに弊社で対応する必要があります。その分のコストを全製品のコストに上乗せすることも可能ですが、弊社のお客様には、システムの利用を求めることなく、限られた予算からご購入いただいている方もいらっしゃいますので、そのような方に従来通りの価格でサービスを提供するために、システムの利用を求められるお客様に対してのみ手数料を徴収しております。システムの利用が発生しない代理店を介していただく場合は、弊社から代理店への提供において手数料は発生しませんが、その分代理店のマージンが発生することになります。ご理解のほどよろしくお願いいたします。

13.1.12 Q. 取引においてどのようなシステムを使う場合に追加の事務手数料は発生しますか？

A.
SAP、Coupa やその他の調達関連のシステムにクロスアビリティがログインし、見積書の提出や入力、受注処理、請求書の発行を行う場合は発生します。これらのいずれかのみを行う場合でも発生します。電子契約システムの利用については発生しません（詳細は *Q.* **取引において電子契約システムを使う場合、追加の事務手数料は発生しますか？** ）。

13.1.13 Q. 取引において電子契約システムを使う場合、追加の事務手数料は発生しますか？

A.
クラウドサイン、Adobe Sign、Docusign などの電子契約システムを使って使用規約やライセンス契約書（サイトライセンス、コーポレートライセンスの場合）にサインすることについては、追加の事務手数料は発生しません。事務手数料が発生するケースは *Q.* **取引においてどのようなシステムを使う場合に追加の事務手数料は発生しますか？** にてご確認ください。

13.1.14 Q. 日本向けとその他の国向けで価格が違うのはなぜですか？

A.
Winmostar は日本国内で長年にわたる導入実績があり、国内向けの製品提供やサポート体制は、日本市場での幅広いご活用を通じて洗練されました。一方、日本国外においては、ライセンス発行、ご契約、ご請求、およびお支払い処理の業務を、グローバルなサービス提供や技術サポートとともに、Winmostar Inc. が担当しています。海外向けの価格には、世界中のお客様に安定したサポートをご提供するために必要な、サービス範囲と運用体制が反映されております。

13.1.15 Q. 日本国外（海外）から、日本国内向けの価格で購入することはできますか？

A.
日本国内向けの価格は、日本国内に所在し、国内向けの取引条件にてご購入されるお客様にのみ適用されます。日本国外のお客様へは、海外向けの取引条件および価格にてライセンスをご提供しております。

13.1.16 Q. 日本国外（海外）のお客様向けの見積書や請求書は、どこが発行しますか？

A.
日本国外のお客様に対する見積書や請求書の発行、およびライセンスのご提供は、Winmostar Inc. が担当いたします。同社は、海外のお客様に向けたグローバルな販売業務およびサポートを統括しています。

13.2 ライセンス・ライセンスコードに関して

13.2.1 Q. 特定ユーザライセンスの登録ユーザ変更は可能ですか？

A. 民間企業・官公庁の場合は不可能です。教育機関の場合は、前回のユーザ変更（初回の変更の場合は購入）から 1 年以上経過していたら変更可能です。特定ユーザライセンスは特定個人しか利用できない代わりに低価格に設定されていますので、ご理解の程よろしくお願いいたします。

13.2.2 Q. 教育機関向けライセンスを購入した時の所属機関から他の機関に移った場合、そのライセンスを使い続けることは可能ですか？

A. 購入時の機関の所属から外れた場合、永久使用権であっても使用できません。教育機関向けライセンスは、教育機関に所属し教育機関の用務に限定して使用する学生・研究者・教員向けの特別価格として弊社が設定しているためです。

13.2.3 Q. 無償版、学生版、無料トライアルからプロフェッショナル版といった具合に、途中から製品を購入するなどしてエディションを変更する際に再インストールは必要ですか？

A. 不要です。これから使用したいライセンスコードを **ツール** → **環境設定** メニューの **ライセンスコード** に入力してください。ライセンスコード以外の設定は引き継がれます。

13.2.4 Q. 無償版とプロフェッショナル版、といった具合に異なるエディションの Winmostar を複数インストールすることは可能ですか？

A. 可能です。その場合は、Winmostar のインストーラでエディションごとに別々のインストール先を指定してください。

13.2.5 Q. すでに入力したライセンスコードを変更する方法を教えてください。

A. これから使用したいライセンスコードを **ツール** → **環境設定** メニューの **ライセンスコード** に入力してください。
学生の方で、無償版から学生版に切り替えたい場合は、ライセンス登録ページ で学生版にチェックを入れて再度ライセンス登録をしてください。
その際、ライセンスコード以外の設定は引き継がれます。

13.2.6 Q. MAC アドレスを表示する方法を教えてください。

A. Winmostar V11 の場合は、ライセンス未登録の状態で起動するとそのマシンの MAC アドレスが表示されます。

Winmostar V10 以下で Windows10 の場合は、まず **スタートメニュー** → *Windows* **システムツール** → **コマンドプロンプト** をクリックしてコマンドプロンプトを起動します。次に、コマンドプロンプトのウィンドウで **ipconfig /all** と入力し Enter キーを押します。様々な情報が出力されるので、その中から「物理アドレス」の行を探してください。その内容が MAC アドレスです。

「物理アドレス」行が複数ある場合、Winmostar のノードロックライセンス購入時に申請する MAC アドレスは、基本的にどの「物理アドレス」でも大丈夫です。

13.2.7 Q. Winmostar のライセンス料に、Gaussian, VASP のライセンス料は含まれていますか？ Gaussian, VASP のライセンスが付属した Winmostar のラインナップはありますか？

A. Winmostar のライセンス料に、Gaussian, VASP のライセンス料は含まれていません。Gaussian, VASP のライセンスが付属した Winmostar のラインナップはありません。Gaussian, VASP の代理店から別途ご購入ください。

13.2.8 Q. ライセンス期限が来るとそれまで使用していた Winmostar はどうなりますか？

A. ライセンス期限が来た後 Winmostar を起動すると、ライセンスコードを入力するウィンドウが立ち上がり、それまで利用できていた各種機能は利用できなくなります。再び Winmostar のライセンスを更新し入力すると、ライセンス期限が来る前の状態を引き継いで使用することができます。

13.2.9 Q. 個人での学習目的に教育機関向けライセンスを購入できますか？

A.
現時点で教育機関に所属し、教育機関での用務に使用しない限り、教育機関向けライセンスをご購入頂けません。個人での利用については *Q.* **個人利用での割引などありますか？個人向けライセンスはありますか？** をご確認ください。

13.2.10 Q. ライセンスの更新の手順を教えてください。

A.
プロフェッショナル版を購入された方は、納品時のメール送信元または 問い合わせフォーム から更新希望の旨をお伝えください。更新希望の連絡後、更新分の見積もりを送付します。その後、弊社に正式に発注が来てから 3 営業日以内に更新分のライセンスコードが納品されます。無償版、学生版の場合は、利用条件に該当するか確認した上で再度登録してください。
新しいライセンスコードを入手したら、[ツール]-[環境設定]-[基本]-[ライセンスコード] の欄を新しいライセンスコードで上書きします。この操作で、それまでの設定を引き継いで引き続きご使用頂けます。

13.2.11 Q. 指導学生が利用予定の学生版を教員が事前に評価したい場合はどうしたらいいですか？

A.
現在の所属学生を通じて学生版を入手して評価してください。その際、評価目的以外での利用は禁止します。教員が自身の研究を進めるために利用する場合はプロフェッショナル版をご購入ください。現在所属学生がいない場合は 問い合わせフォーム から個別にご相談ください。

13.2.12 Q. プロフェッショナル版（トライアル）の利用期限を過ぎると何が起きますか？料金が発生しますか？

A.
利用期限を過ぎると Winmostar を起動できなくなります。自動的に料金が発生するようなことはありません。利用を継続したい場合は、見積もりをご依頼ください。トライアルの利用期間中に生成したデータについては、ご購入後閲覧できるようになります。

13.3 サポート・保守に関して

13.3.1 Q. 保守の内容は何ですか？

使用規約の内容に書かれています。こちら（ Winmostar 使用規約 ）です。

13.3.2 Q. 質問がある場合、担当者に直接メールで問い合わせできますか？

A. ご質問がある場合は、担当者に直接メールせず、まず お問い合わせフォーム からお問い合わせください。理由は、フォームから質問した方がユーザ様にとって結果的に望みの回答を得るまでの期間を短縮できるためです。回答に必要な情報がメールに記載されていない場合は改めてこちらからそれをお聞きする必要があり余計なやり取りが発生します。また、フォームを使わない場合は、改めて弊社内で回答に合わせた担当者のアサインにお時間を頂きます。

13.3.3 Q. 有償のメールサポート（メールでの操作方法サポート）と無償のお問い合わせフォームからの質問の違いを教えてください。

A. Winmostar 固有機能に関する質問・不具合報告については保守の範囲で無償のお問い合わせとなり（リンクはこちら お問い合わせフォーム ）、それ以外については有償のメールでの操作方法サポートまたは個別フォローアップとなります。Winmostar 固有機能とは、Winmostar GUI の動作自体を指し、Winmostar がバックグラウンドで実行する第三者により開発されたオープンソース等のモジュール（ソルバを含む）のことは含みません。
具体的には、無償のお問い合わせの場合は、ドキュメント（チュートリアル、ユーザマニュアル）のご案内が中心となります。ドキュメントに書かれてはいるが、より研究課題に合わせた回答が欲しい場合は有償でご質問いただくことも可能です。
お客様の状況に応じた対応（計算条件のヒアリング、弊社での再現確認など）が必要な場合は個別フォローアップとなり、不要な場合はメールでの操作方法サポートとなります。
迷った場合は、ひとまず無償の お問い合わせフォーム からご質問ください。有償での対応になる場合はその旨をお伝えします。

13.3.4 Q. 不具合サポートやパッチ提供は受けられますか?

使用規約の内容に基づき実施されます。最新の使用規約はこちら（ Winmostar 使用規約 ）です。

13.3.5 Q. 旧バージョンのサポート・保守はどこまで行われますか?

A. ご使用中のバージョンの Winmostar に関する、有効な使用規約に記載の内容に基づきます。また、操作方法の簡単な案内は、可能な範囲で対応します。

13.3.6 Q. Winmostar の開発元（製造元）はどこですか？製造地はどこですか？

A. 株式会社クロスアビリティ です。製造地は日本です。

13.3.7 Q. 開発元（製造元）と直接連絡取ることはできますか?

A. 問い合わせフォーム から連絡を取ることができますが、対応の可否は利用規約に基づきます。最新の使用規約はこちら（ Winmostar 使用規約 ）です。 有償サポート を利用することで、より進んだメールでのサポートが可能となります。

13.3.8 Q. 使用している Winmostar のアップデート・バージョンアップ・アップグレードは可能ですか?

A. マイナーバージョン（およびリビジョン）の更新については、利用可能期間内であれば何回でも実施可能です。メジャーバージョンの更新については、永久使用権の場合はライセンスの更新が必要で、年間使用権の場合は実施可能です。
例として、「V8.039」については、「8」がメジャーバージョン、「039」がマイナーバージョンを指します。
「V9.1.0」については「9」がメジャーバージョン、「1」がマイナーバージョン、「0」がリビジョンを指します。
例えば、Winmostar V9 の永久使用権のライセンス取得者は、V9.1.0 から V9.1.5 や V9.4.4 に更新することは可能ですが、V10.0.0 に更新することは不可能です。

13.3.9 Q. 質問するときの注意事項はありますか？

A. 計算が上手く流れない等の質問の場合、原則として状況を再現するインプットやアウトプットファイルをお送り下さい。

13.3.10 Q. 保守のみの販売はありますか？

A.
Q. Winmostar **本体と保守の価格を分割することは可能ですか？保守のみの販売はありますか？** をご確認ください。

13.3.11 Q. 永久使用権の年間保守が切れた場合何が起きますか？

A.
保守期限切れ前までに使えていたバージョンにて継続して利用することができます。保守を更新すると、更新後にリリースされたバージョンにアップデートすることができます。ただし、異なるメジャーバージョンを跨いでアップグレードする場合は、新規に使用権を購入してください。

13.3.12 Q. 各種ソルバの技術サポートは提供していますか？各種ソルバの技術サポートを受けるにはどうしたらいいですか？

A.
各種ソルバの技術サポートは提供していますが、組織単位での提携・連携など特殊なケースを除き、各種ソルバの技術サポート単体での提供は行っておりません。
Winmostar 付帯サポートの一環として各種ソルバの技術サポートを提供しています。
まずは Winmostar をご購入いただき、製品本体に付属するサポートの範囲でメール質問をしてください。
製品に付属するサポートを使い切った場合には必要な分だけ追加購入してください。
回答にサポートチームがある程度工数をかける必要がある質問内容につきましては、その際に個別に見積もりを作成します。

他社ベンダーのケースでは、オープンソースのソルバの技術サポートを内容にかかわらず定額に設定し、表面上は無制限にサポートするという形式も見受けられます。
しかし、実際にはその金額でどこまでサポートするかは無保証であることが多く、またそのような形式はサポート内容にも難易度のばらつきが多くベンダー・ユーザーそれぞれにとって公平ではないと弊社では考えており、弊社では上記のような形式でのサポートを提供しています。

13.3.13 Q. 電話やオンラインミーティングを用いたサポートは行っていますか？

A. 支払いに関するお問い合わせを除き、電話やオンラインミーティングでの対応は行っていません。購入前の製品内容に対する相談や、機能・サポートに関するご質問は、お問い合わせフォームやメールから承っています。これには 2 つの理由があります。まず 1 つは、Winmostar がカバーする手法が多岐に渡り、ご質問・サポート内容によっては複数人のサポートチームが対応する必要があり、特定時間に電話やミーティングを設定しての対応では効率が悪いためです。2 つめは、弊社の高品質な製品・サポートを今後も低価格で提供し続けることを目標にしており、効率の悪いサポートを極力減らすためです。一方、有償の個別フォローアップや個別プランニングにおいては、お申込みいただいた分だけミーティングを実施致しますので、どうしてもサポートにおいてミーティングが必要な場合はそちらにお申込みください。

13.4 ソフトウェアの機能・利用について

13.4.1 Q. 「Winmostar」の呼び方は何ですか？

A. 「ウインモスター」です。Wikipedia 等では誤情報が掲載されることがありますが、こちらが正式な呼び方です。

13.4.2 Q. Winmostar は社内外のサーバやクラウドに接続しますか?LAN 接続していない状態でも利用可能ですか?

A. リモートジョブを使う場合のみ接続します。デフォルトの操作方法では、一切外部ネットワークに接続することはありません。Winmostar の動作に、ネットワーク接続は必須ではないため、オフライン環境でも使用することができます。ネットワークに接続していない PC にインストールする場合は、**インストール** の手順で登場する各種ソフトウェアを予め他の PC でダウンロードし、ネットワーク接続していない PC に USB メモリなどでコピーしたうえで、**インストール** の手順に従いインストールを行ってください。

13.4.3 Q. Winmostar を動かす PC の最小・推奨スペックを教えてください。

A. Winmostar 本体については **最小・推奨スペック** をご確認下さい。
Winmostar 本体ではなくソルバの実行も含めた推奨スペックが分からない場合は、次のようにしてください。
この質問をされる方は、計算の経験がそこまで多くなく具体的な計算条件と計算負荷のイメージがついていない場合が多いため、そのような方向けの回答となります。
基本的に原子スケールのシミュレーション業務を立ち上げ始めた時期には CAE（構造計算、流体計算）のようにルーチンワークとして四六時中稼働し続けることが稀で、たいていの場合、特に習得し始める頃は研究ツールとしてスポット的に使われることが多いと思われます。
そのような場合、計算時間よりも計算のプランニングや考察に大半の時間が費やされるため、最初から計算機のスペックを気にしすぎるのは得策ではありません。
よって、まず計算内容に対する理解を深める方が計算機の能力よりも重要なので、ブロンズサポート 以上のサポートの導入を推奨します。
計算のプランニングが不適切な場合、適切な場合と比べて何十倍も無駄な計算をしてしまう、ということも起こりえます。
次に、可能であれば 50〜100 万円程度のコア数のできるだけ多い PC（ワークステーション）の利用を推奨しますが必須ではないため、予算的に難しければ現在ご利用中の PC だけでひとまずは問題ありません。
直近の研究課題に対し手元の PC の計算能力だけでは足りなくなった場合は、FOCUS スパコン や HPC システムズサイエンスクラウド などのクラウドサービスを利用し大きな計算能力を一時的に確保することができます。
1-2 年経つと業務に必要な計算量が分かりますので、その上で手元に置く PC を選定するとよいかと思われます。

GPU については、Winmostar ではローカルジョブで計算に使用できるようになっていないため、考慮する必要はありません。リモートジョブにおいても、GPU を導入するメリットが導入の手間・コストを上回るケースは限られているため、ひとまずは考えないことを推奨します。

13.4.4 Q. Winmostar で作成したデータ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。

13.4.5 Q. Winmostar の画面を撮影した動画・画像を YouTube、SNS などのウェブ媒体にアップロードすることは可能ですか？

A. 可能です。アップロードする際には、Winmostar の HP の URL を引用し、Winmostar を使用していること、使用した Winmostar のバージョンを明記してください。なお、ライセンスキーが表示される環境設定ウィンドウなどのアップロードは固く禁じます。

13.4.6 Q. Winmostar そのものに各種計算用ソフトがインストールされていますか？

A. MOPAC、CNDO/S のみ Winmostar にインストールされています。それ以外のソフトは、ライセンスの関係上 Winmostar には同梱されておらず、別途インストールする必要があります。多くのソフトは無料でインストール可能で、その手順は **インストール** で紹介されています。

13.4.7 Q. Winmostar はクラウド上で計算させていますか？

A. クラウド上で計算させることも可能ですが、させないことも可能です。デフォルトではクラウドを利用せず、Winmostar をインストールした Windows PC 上で計算をさせます。

13.4.8 Q. Winmostar は GPU 計算に対応していますか？

A. GPU 計算に対応していますが、デフォルトでは GPU を使わない設定になっています。一部のソルバが GPU に対応していますが、動作確認、ビルド、設定作業は有償での対応となります。すでに GPU を使う設定でソルバをビルドし終わっていて、Winmostar を使わない状態での動作確認が済んでいる場合は、Winmostar の側の設定のみで Winmostar から GPU 計算を利用することができます。Winmostar 側の問題ではなく、ソルバ側の都合により、OS、マシン構成（GPU 含む）、ソルバの種類・バージョンの組み合わせによっては GPU を使う設定でのビルドができない場合があるため（むしろほとんどの場合がそれに該当します）、GPU の導入前にシミュレーション用のハードウエアを提供するベンダーにご相談頂くことをお勧めいたします。

13.4.9 Q. Intel と AMD のどちらの CPU の方が動作に適していますか？どちらがお勧めですか？

A. 多少の優劣の差はありますが時期によって状況は変化します。基本的には際立ってどちらかが優れているという状況ではありません。Intel と AMD の差に気を遣うよりは、コンピュータ全体として安定動作することと、予算の中でコア数が大きいコンピュータにすることを優先してください。その点は、ハードウエアベンダーにお問い合わせください。

13.4.10 Q. Winmostar を使って並列計算は可能ですか？

A. 可能です。詳細は、ファイルモードの場合は各ソルバのキーワード設定ウィンドウ、プロジェクトモードではジョブの設定ウィンドウで設定できます。

13.4.11 Q. Winmostar を使って並列計算する際、利用できるコア数の上限はありますか？利用できるコア数に応じて費用は変わりますか？

A. ユーザが用意したハードウエアの範囲内で、制限なく並列数を指定して頂けます。並列数に応じて、Winmostar のライセンス料は費用は変化しません。ローカルジョブの場合は、 *Winmostar Job Manager* で設定した最大コア数を上回るとジョブが流れないため、最大コア数の設定を変更してください。

13.4.12 Q. Winmostar は macOS、Linux で動作しますか？

A. Winmostar のアプリケーション本体は Windows OS のみ正式サポートされています。サポートされている Windows OS の確認は 動作環境 で可能です。macOS、Linux で Winmostar のアプリケーション本体を動かす場合は、VirtualBox などの仮想環境上に Windows OS をインストールした上でご使用ください。ただし、CygwinWM 上の Gromacs など一部機能が正常動作しない場合があるため、正式サポートの対象外となります。リモートジョブを実行するコンピュータには、Linux・macOS を使用できます。

13.4.13 Q. Winmostar は Arm 系 CPU で動作しますか？

A. 弊社において正常動作する組み合わせが確認されています。2025 年 12 月時点では通常出荷前に実施される自動テストは x86 系 CPU 上でのみ実施され、Arm 系 CPU 上でのテストは弊社が必要と判断したタイミングでのみ実施しています。正常動作確認された組み合わせは **最小・推奨スペック** にてご確認いただけます。なお、2025 年 11 月時点では Windows11 の Arm CPU 向けの x86 CPU エミュレーターが原因で CygwinWM 上の Gromacs や溶媒配置機能が動作しないことが確認されていました。CPU が x86 系であるか Arm 系であるかに関わらず、ご購入前に トライアル で動作検証することを推奨いたします。今後、Arm 系 CPU での動作確認状況について定期的に更新予定です。Arm 系においては 2026 年 5 月時点ではエミュレーションでの対応となりますが、Winmostar 本体または CygwinWM のネイティブ対応についても検討しています。

13.4.14 Q. Gaussian のインストール方法を教えてください。

A. Gaussian のインストール方法は、Gaussian の販売代理店より入手してください。Gaussian をインストールした後は、**ツール** → **環境設定** → **プログラムパス** において、Gaussian のプログラムパス（g03.exe, g09.exe, g16.exe など）を選択してください。

13.4.15 Q. VASP のインストール方法を教えてください。

A. VASP のインストール方法は、VASP の販売代理店より入手してください。VASP はリモートジョブでのみ利用可能です。VASP をインストールした後は、テンプレートスクリプトを編集し、VASP のバイナリと擬ポテンシャルファイルを置いたディレクトリを指定してください。

13.4.16 Q. CygwinWM のインストーラを起動しようとすると Windows あるいはエクスプローラがフリーズします。どうしたらいいですか？

A. セキュリティ対策ソフトが CygwinWM のインストーラを妨害している可能性が高いですセキュリティ対策ソフトの監視対象の例外に CygwinWM のインストーラを指定してください。様々なケースでこの現象は起こり得ます。エクスプローラ上でインストーラをクリックしただけでスキャンが実行されフリーズすることもあります。実際に報告があったのは、2025 年 6 月 9 日に Trend Micro Apex One が動作する Windows 11 環境で cygwin_wm_20250413.exe を起動した際です。

13.4.17 Q. Winmostar で何原子あるいは何分子まで計算できますか？扱える原子数、分子数の上限はありますか？

A. 動作速度は考えないとすると、100 万原子程度までの動作確認はしています。動作速度は実行環境に強く依存するため、ご購入前に無料トライアルでご確認ください。なお、将来のバージョンでは Winmostar の高速化を計画しております。

13.4.18 Q. Winmostar で粗視化モデルの計算はできますか？

A. 純粋な量子化学計算、第一原理計算、古典分子動力学計算ではないという意味での粗視化モデルとしては、LAMMPS を用いた散逸粒子動力学（DPD）計算と Kremer-Greset モデルに対応しています（Kremer-Grest については別途お問い合わせください）。United atom モデルやその派生の粗視化モデルは今後対応予定です。それ以外のモデルについては、個別にお問い合わせください。個別対応としている理由は、粗視化モデルを用いたほとんどの研究が、ソフトを使うだけでは有意義な結果が得られず、入念かつ慎重なコンサルティングが必要であるという認識を我々が持っているためです。Winmostar のサポート事例では、十分に検証を行った粗視化モデルのシミュレーション結果を紹介しています。

13.4.19 Q. 安定版最新バージョンと開発版最新バージョンの違いは何ですか？どちらがお勧めですか？

A. 開発版最新バージョンは最新のマイナーバージョンの最新リビジョン、安定版最新バージョンは最新の一つ前のマイナーバージョンの最新リビジョンとなります。（例えば V11.10.3 の場合は 11 がメジャーバージョン、10 がマイナーバージョン、3 がリビジョンを意味します。）マイナーバージョンの更新時は、新機能の追加や比較的大きい仕様変更が行われます。リビジョンの更新時は不具合の修正や比較的小さい仕様変更が行われます。開発版最新バージョンでしか使えない新機能を使う必要がない場合は安定版最新バージョンの利用を推奨します。

13.4.20 Q. Winmostar を使用して得られた計算結果・出力ファイルの権利は誰に帰属されますか？

A. ユーザに帰属します。ユーザに自由に使用して頂くことが可能です。

13.5 ソフトウェア動作全般に関して

13.5.1 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。

A. 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、プロフェッショナル版、プロフェッショナル版（トライアル）のいずれに該当するか確認し、問題を起こしている機能が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、CygwinWM、および各ソルバ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（スペースも不具合の原因となります）が含まれている場合は、一部ソルバで不具合が出ることが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「ログを表示」などをクリックし、ログの内容を確認する。
- 計算の不具合については、各種ソルバのバージョンが、Winmostar のインストールガイドで推奨しているバージョンと同じであるか確認する。（特に Quantum ESPRESSO, Gromacs, LAMMPS）
- Windows の"ワールドワイド言語サポートで Unicode UTF-8 を使用"オプションが有効な場合は無効にする。（詳細は *Windows* **の"ワールドワイド言語サポートで** *Unicode UTF-8* **を使用"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。** ）
- プロジェクトまたはファイルをネットワークドライブに保存して使用し想定外の挙動が見られた場合は、ネットワークドライブではないドライブ（C ドライブなど）に保存して使用する。

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。

- 基礎編と全く同じ物質・条件で計算していることを確認する。（Winmostar に限った話ではなく、物質や条件が違ったあらゆる場合においてチュートリアル記載の方法で計算が正常終了するとは限りません）
- 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。

- プロジェクトモードでジョブが流れない場合はファイルモードで試す。（詳細は *Q.* **インストールテストは正常終了しますが、プロジェクトモードのジョブが常に失敗します。どうしたらいいですか？** ）
- 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、CygwinWM 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。
- CygwinWM を使用している場合は、 **ヘルプ** → *CygwinWM* **を診断** で CygwinWM の簡易的な診断を実行する。
- Winmostar, CygwinWM 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（原子数、スーパーセルのサイズ、重合度、元素の種類、相の数など）、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。

13.5.2 Q. インストールテストは正常終了しますが、プロジェクトモードのジョブが常に失敗します。どうしたらいいですか？

A. プロジェクトモードでジョブの実行を担うスクリプトの活動が妨害されている可能性があります。セキュリティ対策ソフトの活動を監視してください。セキュリティ対策ソフトが妨害していた場合は、プロジェクトをセキュリティ対策ソフトの監視対象外の領域に保存してください。

13.5.3 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ください。

13.5.4 Q. Cygwin を使う処理が異常終了します。／ ツール → *CygwinWM* 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。

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) Windows セキュリティ開き **アプリとブラウザーコントロール** から *Exploit Protection* **の設定** クリックする。そして、 **イメージのランダム化を強制する** の値を **既定でオフにする** か **既定値を使用する（オフ）** に変更する。

4) **イメージのランダム化を強制する** の値が Windows を再起動するとリセットされてしまう場合は、PowerShell を管理者権限で起動し、以下のコマンドを実行する。(CygwinWM を C:\cygwin_wm にインストールした場合を想定。バックスラッシュ「\」は半角円マーク「¥」で入力。)

```
cd C:\cygwin_wm
Get-ChildItem -Recurse -File -Include *.exe | %{ Set-ProcessMitigation -
↪Name $_.Name -Disable ForceRelocateImages }
```

そして、 C:\cygwin_wm の下の make_symlink.cmd をダブルクリックする。

5) ほかのアプリケーションが終了した状態で動作確認を行う。(稀に他のアプリケーションと競合することがあります。)

6) 使用している CygwinWM 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 CygwinWM 以外に cygwin1.dll が存在して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、各種フリーウエアなどに同梱されていることがあります。

7) 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 (CygwinWM 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。

8) セキュリティ対策ソフトを一時的に無効する。

9) 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。

10) 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) Cygwin 公式サイト の Cygwin を新規にインストールし、そこからターミナル (端末) を起動できるか確認する。

13.5.5 Q. ツール → *CygwinWM* を診断 機能で *No reference file (... filelist_cygwinwm.txt) was found...* と表示されます。

A. CygwinWM 診断機能ではまず最初に、CygwinWM をインストールしたフォルダの直下の filelist_cygwinwm.txt というファイルを探しに行っており、このファイルがないというエラーが出ています。CygwinWM をインストールされた場所 (デフォルトでは C:\cygwin_wm) で filelist_cygwinwm.txt を探し、その直上のフォルダを [ツール]-[環境設定]-[プログラムパス] で指定してください。filelist_cygwinwm.txt が見つからない場合は CygwinWM のインストールに失敗した可能性があるので、セキュリティソフトの設定などを見直したうえで CygwinWM を再インストールしてください。

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

A. CygwinWM 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。

13.5.7 Q. ツール → *CygwinWM* を診断 機能で *ERROR ... Failed to generate a current file list* と表示されます。

A. Cygwin 環境が破損している可能性があります。 *Cygwin* **の一般的な不具合** を確認してください。

13.5.8 Q. ツール → *CygwinWM* を診断 機能で *ERROR: Getting SMILES ...* と表示されます。OpenBabel の処理が異常終了します。

A. Windows 版の OpenBabel を CygwinWM とは別にインストールしている場合、Winmostar の内部処理で CygwinWM の OpanBabel を使うべきところを Windows 版の OpenBabel を使って不具合を起こすことがあります。Windows 版の OpenBabel をアンインストールするか、環境変数の PATH から Windows 版の OpenBabel のインストールフォルダを削除してください。

13.5.9 Q. ジョブマネージャに登録されたジョブが実行されません。

A. 指定した MPI の並列数がジョブマネージャの MaxCore の設定より大きいとジョブは実行されません。
MaxCore の初期値値は実行している PC のコア数に設定されているはずですが、それが変更されていないか、または MPI の並列数をそれより多く設定していないか確認してください。
ジョブマネージャを使用しないで実行したい場合は、 **ツール** → **環境設定** 画面の **計算** タブの「MOPAC をジョブマネージャで実行」や「その他のソルバをジョブマネージャで実行」のチェックを外します。

13.5.10 Q. ジョブマネージャでジョブを停止しても、表示上 ABORT になりますが、ジョブのプロセスが続いたままです。

A. Windows11 で「既定のターミナル アプリケーション」が「Windows ターミナル」になっている場合は、「Windows コンソール ホスト」に変更することにより、回避できる可能性があります。

13.5.11 Q. ジョブの実行時に「実行できません（アクセスが拒否されました。）」と表示アラートが出現しジョブが開始されません。

A. **一般的な不具合の対処** を試してください。特に、インストールした Winmostar およびソルバのフォルダをセキュリティ対策ソフトの監視対象から外してください。

13.5.12 Q. Winmostar の各種機能やソルバーの実行など、黒いコンソール画面が出現する機能において、黒いコンソール画面の処理が終わらず先に進みません。

A. 黒いコンソール画面の中をたまたまクリックしてしまうと、Windows の仕様上そこから処理がペンディングしてしまいます。
コンソール画面のウィンドウがアクティブの状態で ESC キーを押すと、処理が再開されます。

13.5.13 Q. ファイルを開いたり、分子をモデリングした際に、結合が出現しなくなってしまった。または、無駄に結合が多く出現するようになってしまった。

A. まず、量子化学計算と第一原理計算（固体物理計算）では、結合の情報は計算結果に一切影響を与えないため、結合の有無はあくまで表示上の問題であることを前提にお考え下さい。Winmostar をインストールした直後の状態から結合の生成挙動が変わってしまった場合は、 **ツール** → **環境設定** → **編集** の **結合判定係数** の値が適切でない可能性があります。デフォルト値に戻すか、1.15 程度の値に設定してください。デフォルトの状態でも望みの状態にならない場合は、 **編集** → **結合を付加/変更** または **編集** → **結合を削除** を使い、結合の作成または削除してください。

13.5.14 Q. Windows のエクスプローラ上で拡張子を表示するにはどうしたらいいですか？

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, 11 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

13.5.15 Q. マーカー（赤丸）やグループ選択（青丸）が表示されなくなりました。原子を選択できなくなりました。

A. **表示** → **表示項目** → **選択原子マーカー** にチェックを入れてください。

13.5.16 Q. ツールバー、ツールボタンの表示が崩れました。直すことはできますか？

A. まずは Winmostar を終了し、UserPref フォルダのバックアップを作成したうえで UserPref フォルダの中身を削除し Winmostar を再起動してください。それでも変わらない場合は *Windows* **のディスプレイ拡大率が** *100* **%以外の時に** *Winmostar* **のツールバー、ツールボタンの表示が崩れる。** の対処法を試してください。

13.5.17 Q. 最適化フラグとは何ですか？

A. **最適化フラグを変更** を参照してください。

13.5.18 Q. Winmostar から直接計算を実行せず、ファイルだけを保存させることはできますか?Winmostar が生成するファイルを編集してからジョブを流すことはできますか?

A. はい。 **基本的な操作の流れ** で「Winmostar から直接計算を実行せず、ファイルだけを保存したい場合」の手順を実行してください。

13.5.19 Q. 各ソルバの最新バージョンあるいは Winmostar の動作環境に記載のないバージョンを、Winmostar から利用することは可能ですか?

A. そのソルバで利用したい機能の種類によります。概ね基礎的な機能は動作することが期待されますが、それを保証しているわけではありませんので、Winmostar の 動作確認 に記載のないバージョンを利用したい場合は、ご購入前にトライアルで動作確認頂くことを推奨します。動作確認に記載しているバージョンは、Winmostar の出荷前テストで使用しているバージョンとなります。一部のソルバ（Quantum ESPRESSO, LAMMPS など）については、 **ツール** → **環境設定 メニュー** において、Winmostar が出力するファイルが対応するソルバのバージョンを切り替えることができます。

順次 Winmostar が対応するソルバのバージョンについては更新していく予定となっています。対応バージョンの更新について予定時期が特に明示されておらず、すぐに対応が必要な場合は、有償カスタマイズの利用をご検討ください。

13.5.20 Q. ウィンドウをリサイズすると分子表示エリアの表示が崩れます。どうしたら解消しますか？

A. Arm 系 CPU の場合は、Windows の設定 → アプリ → インストールされているアプリ、にて「OpenCL、OpenGL、および Vulkan 互換機能パック」をアンインストールしないと、Winmostar の表示が乱れることがあります。アンインストールすることで表示が正常に戻ることが確認できています (2026 年 6 月 22 日時点)。

13.6 ファイル入出力に関して

13.6.1 Q. Winmostar 以外で生成されたファイルを Winmostar で開けません。また、Winmostar で生成したファイルを編集してから Winmostar で開こうとしても開けません。

A. 改行コードやエンコーディングが変化していないか確認してください。それでも開けない場合はファイルを添付の上 問い合わせフォーム からお問い合わせください。

13.6.2 Q. MOL 形式または SDF 形式のファイルを開くと、結合長が不自然になります。水素が出現しません。

A. 次の手順で分子構造を修正してください。(1) **結合長を自動調整** (2) *Z-Matrix* **を再生成** (3) **選択原子に付加（自動）** SDF ファイルの場合は *SDF* **ファイルの編集** の手順を参考に操作してください。

13.6.3 Q. SMILES を読み込んでも意図通りの構造が生成されません。なぜですか？どうしたらいいですか？

A. SMILES を読み込む外部プログラムの特性により意図通りの構造が生成されないことがあります。SMILES を読み込む外部プログラムを切り替えることで解決することがあります。ファイル → インポート →SMILES で、 *Use OpenBabel* と *Use Balloon* のどちらかを選択してください。

13.7 分子のモデリング・系の作成に関して

13.7.1 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** → **結合を付加/変更** またはメインウィンドウ上部の **結合を付加/変更** 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** → **原子/結合の自動調整** → **結合を再生成** 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** → **原子/結合の自動調整** → **簡易構造最適化** により構造最適化しておくと、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。

13.7.2 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 に下記のように出力され処理が正常終了しません。

```
gmx insert-molecules -try 100 -f gmx_tmp_water.gro -o gmx_tmp_water_tmp.gro -ci mol0.gro␣
↪-nmol 64
...
set +v
Error : Failed to solvate.
```

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。

13.7.3 Q. 一部の機能を実行したときに *\357\273\277* 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 packmol.log に下記のように出力され処理が正常終了しません。

```
/cygdrive/C/winmos11/UserData/builder_tmp/packmol.sh: line 1: $'\357\273\277packmol':␣
↪command not found
```

A. \357\273\277 は BOM という UTF 形式のテキストファイルに含まれるコードで Cygwin や Linux 環境のプログラムでは対応しておりません。コントロールパネルの [時計と地域]-[日付、時刻、数値形式の変更]-[管理] タブ-[システムロケールの変更] で [ベータ: ワールドワイド言語サポートで Unicode UTF-8 を使用] にチェックが入っている場合は、差し支えなければチェックを外してください。

13.7.4 Q. AM1-BCC 電荷を計算できない場合はどうしたらいいですか？

A. 一部の元素を含む場合（例えばホウ素 B など）は、AM1-BCC の計算に使用している acpype が処理を中断します。そのため、現状では AM1-BCC 電荷の使用をあきらめることになります。RESP 電荷の計算は成功することもありますので、そちらをお使いください。

13.8 ローカルマシンでの MPI・並列実行に関して

13.8.1 Q. 自分で流す並列計算が異常終了するのはなぜですか？インストールテストの並列テストには成功します。並列なしの計算も正常終了します。

A. 並列数を 2, 4, 6... と徐々に上げて挙動を観察してください。問題サイズに対し並列数が大きすぎると異常終了することがあります。また、高性能コア（P コア）と高効率コア（E コア）を持つ世代の Intel Core シリーズの CPU を利用している場合は、並列数が P コアのコア数を超えないようにしてください。

13.8.2 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 readv, 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。

13.8.3 Q. Quantum ESPRESSO, LAMMPS 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。

13.8.4 Q. dotNetFx35setup.exe を用いた.NET Framework 3.5 のインストールに失敗します。どのようにしたらいいですか？

A. Windows PowerShell からインストールすることで回避できることがあります。Windows PowerShell を管理者権限で起動し以下のコマンドを入力してください。

```
Set-ItemProperty -Path 'HKLM:\Software\Policies\Microsoft\Windows\WindowsUpdate\AU' -
↪Name 'UseWUServer' -Value 0;
restart-service wuauserv;
dism /online /Enable-Feature /FeatureName:NetFx3;
Set-ItemProperty -Path 'HKLM:\Software\Policies\Microsoft\Windows\WindowsUpdate\AU' -
↪Name 'UseWUServer' -Value 1;
```

13.8.5 Q. 並列数の欄をプルダウンしても、設定したい並列数が見つかりません。どのようにしたら設定したい並列数に設定することができますか？

A. プルダウンして選ぶのではなく、並列数の欄にキーボードで値を入力してください。並列数の欄には、キーボードで任意の値を入力することができます。

13.8.6 Q. ローカルジョブにおいて、複数のジョブを同時ではなく逐次実行するにはどうしたらいいですか？

A. 各ジョブが使うスレッド数・MPI プロセス数と同じ数を Winmostar JM の Max Cores に設定してください。

13.9 リモートジョブに関して

13.9.1 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。
詳しくは **リモートジョブ** をご確認ください。

13.9.2 Q. 各種のターミナルソフトでは SSH 接続できるサーバに Winmostar から接続できません。

A. まずは **リモートジョブ** に記載の手順を確認してください。それでも解決しない場合、Winmostar で SSH 接続に使用しているライブラリである libssh のバージョンを変えることで接続できる場合があります。[ツール]-[環境設定]-[計算]-[SSH 接続に古いバージョンの libssh2(1.8.2) を使用する] にチェックを入れてください。
また、鍵の暗号化方式に RSA を使用している場合は Ed25519 方式の鍵を使用すると解決する場合があります。
手順は *SSH* **公開鍵・秘密鍵認証での接続方法** でご確認いただけます。

13.9.3 Q. 公開鍵方式の SSH 接続に失敗します。TeraTerm や Cygwin など他のソフトで同じ秘密鍵ファイルを指定すると接続に成功します。解決法はありますか？

A. *Q.* **各種のターミナルソフトでは** *SSH* **接続できるサーバに** *Winmostar* **から接続できません。** を参照してください。

13.9.4 Q. *Test Connection* での接続テストは成功するが、ジョブの投入 (サブミット) に失敗します。

A. 様々な理由が考えられます。以下にいくつかの例を示します。

1. TSUBAME3.0 など、SSH 接続の回数制限がある場合は、 TSUBAME3.0 での SSH アクセス数制限について に記載の方法で、SSH 接続を都度実行せずにつなぐ方法で回避することができます。
2. サーバ側で、秘密鍵認証だけでなく、パスワード認証もアクティブにすることで回避できる場合もあります。
3. ログインサーバの実体が複数あり、バックグラウンドで自動選択される場合は、特定のログインサーバのみを利用するか、全てのサーバが cache 登録されるまで接続しておくことで回避できる場合もあります。
4. ローカルマシンから Winmostar がジョブ投入コマンド（ **qsub** など）を投げても、リモートサーバ上でコマンドが見つからない場合があります。 *Submit Remote Job* ウィンドウの *Profile --> Edit Profile...* の *Prefix for queueing commands* に、 **qsub** 等の実行ファイルのパスを記入することで回避できます。例えば、 **qsub** のフルパスが **/usr/local/bin/qsub** の場合は、 *Prefix for queueing commands* に「/usr/local/bin/」と入力してください。

13.9.5 Q. *Test Connection* での接続テストは成功するが、Putty の WARNING が表示され各種の操作に失敗します。

---------質問詳細---------
TestConnection 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 TestConnection 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 *Connection* → *Open Putty* 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。)

13.9.6 Q. リモートサーバではどの種類の MPI（MPICH、OpenMPI など）を使用できますか？

A. 基本的にどの種類の MPI も利用可能です。MPICH、OpenMPI、MVAPICH などで動作実績があります。
テンプレートスクリプトを編集することで、source、module、export といったコマンドを自由に実行し、任意の MPI を実行する環境を設定できます。
使用するソルバは、使用する MPI（mpicc, mpif90）でコンパイルされている必要があります。

13.9.7 Q. リモートサーバで bashrc などに記入して設定しているはずの環境変数（PATH など）が、Winmostar から実行した時に設定されないことがあるのはなぜですか？そのような場合はどうしたらいいですか？

A. インタラクティブにターミナルでシェルの操作をする場合と ssh コマンドの引数で直接コマンドを実行する場合とでリモートサーバ上で処理フローが異なることがあるためです。bash コマンドの引数で実行する場合も同様のことがあります。対処方法としては、テンプレートスクリプトを作成し、その中で別途環境変数の設定等を明示的に記入してください。
WSL2 を含む Ubuntu マシンをリモートサーバにしている場合は こちら も参考にしてください

13.9.8 Q. Windows 版のソルバと Linux 版のソルバの間で動作に違いはありますか？

A. 計算速度を除く機能面での違いは基本的にありません。コンパイラ・MPI・コンパイル設定の違いにより性能は変化します。

13.9.9 Q. 異なるサーバ上で流すリモートジョブを計算を同時に実行することはできますか？

A. はい。ただし、プロジェクトモードでは各ジョブが実行時のプロファイル情報に紐づけられるため、それぞれのサーバごとに異なるプロファイルを作成してください。

13.9.10 Q. リモートジョブのプロファイルで記入したパスワードはどこに保存されますか？プロジェクトフォルダにパスワードの情報は保存されますか？

A. パスワードはユーザ設定フォルダ（Winmostar インストールフォルダの UserPref）の下の winmos_profile.ini に暗号化されて保存されます。他の場所には保存されませんので、プロジェクトフォルダにパスワードの情報が保存されるようなことはありません。例えばサポートのためにプロジェクトフォルダを送る際にもパスワードの情報は送られません。

13.9.11 Q. WSL2 利用を含めた Ubuntu マシンへ SSH 接続はできるにもかかわらず、リモートジョブ実行が正常に行えないのはなぜですか？

A. Ubuntu マシンでは、.bashrc ファイルの冒頭に書かれている下記の部分のため、リモートジョブ実行では、この後に設定させている PATH 等の設定が反映されません。

```
# If not running interactively, don't do anything
case $- in
    *i*) ;;
      *) return;;
esac
```

これらの行を削除もしくはコメントアウトしてください。

また、WSL2 の Ubuntu の場合、zip がデフォルトで入っていないため、下記のコマンドも実行して、zip をインストールしてください。

```
sudo apt-get install zip unzip
```

13.9.12 Q. FOCUS スパコンなど外部のリモートサーバで急にジョブ投入が失敗するようになりました。

A. CPU 利用枠を使い切ったか、ディスク利用量が上限に達した可能性があります。お使いのマシンでの利用状況を確認してください。

FOCUS スパコンでは、2026 年 10 月から 1 課題当たりの home1 の無償利用枠が 200GB から 10GB になりました。課題 ID を xxx とすると、df -h /home1/gxxx とコマンド入力してディスク利用状況を確認してください。コマンド入力は、**ツール** → **リモートサーバ** の中のお使いのリモートサーバのプロファイルを選択して、Control Remote Job/Server ウィンドウの白い枠内で行ってください。

13.9.13 Q. FOCUS スパコンなど外部のリモートサーバ上のファイルを削除したい。

A. プロジェクトモードならプロジェクト自体、もしくは特定の作業フォルダ以降をまとめて削除できます。メインウィンドウの削除したいプロジェクトもしくは作業フォルダを右クリックして delete を選択してください。

手動で削除する場合は、Putty や WinSCP 等でログインして行ってください。

FOCUS スパコン上のファイルを削除する際は、どちらも場合も VPN 接続をした状態で操作してください。

13.10 シミュレーション全般に関して

13.10.1 Q. ある物質とある物質の間の相互作用を計算することは Winmostar で可能ですか？

A.「相互作用」という言葉の定義は広いため、定義によります。
まずは、着目している物質の量子化学、第一原理、分子動力学計算自体を実行できるか、という意味では、各ソルバ（GAMESS, Gaussian, Quantum ESPRESSO, LAMMPS, Gromacs）で実行可能な内容に Winmostar は依存しているので、各ソルバのマニュアルを予め調べてください。
次に、何か着目している物性や現象のメカニズムを知りたいという意味での相互作用については、その物質系固有の知識が必要となるため、計算可能かどうかの調査自体に十分な調査が必要となるため、すぐには回答できません。民間企業向けに有償で調査を行うサービスも用意しています。
相互作用により生じた結合、会合を定量的に評価したい場合は、絶対零度であれば結合距離に対するエネルギーの変化、運動状態であれば結合する物質間の動径分布関数や結合の時系列データの自己相関関数から議論できます。
最後に、Kitaura-Morokuma 解析や MD における Coulomb・vdW 相互作用などの相互作用エネルギー解析のように、具体的な解析内容が分かっている場合は、その旨をご質問ください。

13.10.2 Q. 分子内のある結合に関する結合エネルギーや結合解離エネルギーを計算することはできますか？

A. 結合した状態と解離した状態の安定な構造の量子化学計算を行い、そのエネルギー差から計算してください。解離状態の 2 分子は別々に計算して、その際スピン・電荷の設定は慎重に行ってください。

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

13.11.1 Q. 量子化学計算の実行中にエラーが起こるがどうしたらいいですか。

A. まずは Winmostar のチュートリアルをトレースしてください。それで失敗する場合は環境構築に失敗している可能性があります。Gaussian については、並列計算が可能なライセンスかどうかも確認してください。
次に、プロジェクトモードで計算した場合は、該当する計算の作業フォルダのエラー欄を確認してください。マウスのポインタを作業フォルダ上に置いても、エラーを確認できます。エラーメッセージがよくある質問の中にあれば、そこに書かれた対処方法を試してください。特に大きな分子の IR 計算では、デフォルトのメモリ指定量では足りずに止まることがあります。
エネルギー (SCF) 計算が収束しない場合は、以下の内容を確認もしくは試してください。
- 初期構造、電荷、スピン多重度が適切かどうか確認してください。
- 大きな基底関数、分散 (diffuse) 関数を使うと収束が難しくなります。より小さな基底関数の利用を検討してください。
- GAMESS の DFT 計算で「CONVERGED TO SWOFF, SO DFT CALCULATION IS NOW SWITCHED ON」の表示の後、収束に近づかずに「DFT CODE IS SWITCHING BACK TO THE FINE GRID」の表示が出ない場合は、Keyword Setup ウィンドウの DFT タブで変数 NRAD0 及び NLEB0 の設定をしてください。
- 小さな基底関数の結果を初期軌道にすると大きな基底関数でも収束する可能性が高くなります。プロジェクトモードでは、Gaussian の場合、まず小さな基底関数でエネルギー計算を行い、次に継続ジョブとして大きな基底関数での計算を行います。その際に継続元は小さな基底関数の計算を指定して、さらに Keyword Setup ウィンドウで guess=read にチェックを入れてください。GAMESS の場合、まず基底関数を MINI に設定してエネルギー計算を行い、次に継続ジョブとして大きな基底関数での計算を行います。その際に継続元は小さな

基底関数の計算を指定して、さらに Keyword Setup ウィンドウで Import $VEC をクリックして、継続元作業フォルダにある gms.pun を指定して、Advance(2) タブの$GUESS の GUESS を RDMINI に変更してください。

- Gaussian, GAMESS の場合、ローカルジョブで 2 つ以上のジョブを同時に実行すると、メモリ管理等の問題により異常終了することがあります。これは逐次実行することで解決します。逐次実行するための手順は *Q.* **ローカルジョブにおいて、複数のジョブを同時ではなく逐次実行するにはどうしたらいいですか？** にて確認してください。

13.11.2 Q. MOPAC、GAMESS、Gaussian、NWChem のキーワード設定ウィンドウや Easy Setup ウィンドウで、使用したい計算手法（Hamiltonian）、基底関数（Basis Set）が選択肢の中に見つかりません。どのように設定したらいいですか？

A. 計算手法、基底関数の設定欄に直接キーボードで入力できる場合は、直接入力することができます。分極関数（「*」や「p」「d」「f」で表現されるもの）の指定方法はソルバごとに記述が異なることがあるので、それぞれのソルバのマニュアルを確認してください。

13.11.3 Q. 入出力ファイルを開くときや結合を再生成する際に、結合はどのように判定されますか？

A. **結合判定基準** を参照してください。

13.11.4 Q. 系のモデリング中や、計算結果を読み込んだ際に、不要な結合が表示されます。または結合が表示されません。どのように対処したらいいですか？

A. **こちらの** *FAQ* を参照してください。

13.11.5 Q. Winmostar から量子化学計算を用いて部分構造の最適化は可能ですか？

A. V11.15.0 時点での対応は以下のようになっています。

MOPAC6: Z-Matrix のみ対応
GAMESS: 対応
Gaussian: 対応
NWChem: Z-Matrix のみ対応

13.11.6 Q. Winmostar 分子表示エリア下部に表示される Dipole moment の値と、Mulliken 電荷などの各原子に割り当てられた電荷から手動で算出した双極子モーメントの値が異なるのはなぜですか？

A. Winmostar 分子表示エリア下部に表示される Dipole moment の値は、MOPAC、GAMESS、Gaussian、NWChem が直接出力する分子系全体での双極子モーメントとなっています。この値は、負電荷の電子全ての重心と正電荷の原子核全ての重心を計算して厳密に算出された双極子モーメントとなります。この値の算出において、電子を各原子に割り当てる操作は経由していません。

一方、Mulliken 電荷など原子ごとの電荷算出では、原子間の境界を一意に決めることができず任意性が残ります。Mulliken、NBO 電荷など電荷算出方法により各原子への電荷の割り当て式は異なります。そのため、Mulliken 電荷等から算出する双極子モーメントの値は、Winmostar 分子表示エリア下部に表示される MOPAC、GAMESS、Gaussian、NWChem が出力する分子系全体での双極子モーメントの値と少し異なります。

13.11.7 Q. MOPAC で計算できる最大原子数はいくつですか？

A. 重原子（水素以外）70、軽原子（水素）90 です。
マニュアルページ から大分子対応版 MOPAC6 の実行バイナリ (最大 420 原子) をダウンロードして使用することもできます。
Winmostar はオープンソース版 MOPAC での動作を確認しています。
オープンソース版 MOPAC は原子数の制限はなく 2022 年から無料で利用できます。
MOPAC 本家ページ

13.11.8 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。

13.11.9 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、使している 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になります。
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。

13.11.10 Q. Winmostar に付属の MOPAC で溶媒効果（COSMO 法）を使用するにはどうしたらいいでしょうか。

A. Winmostar に付属の MOPAC は溶媒効果（COSMO 法）に対応していません。MOPAC より計算時間が掛かりますがより精度の高い GAMESS を用いた計算をご検討ください。

13.11.11 Q. Winmostar 内蔵以外の MOPAC(MOPAC2016 など) で計算すると、一部の分子軌道しか表示されません。

A. MOPAC Setup ウィンドウの ALLVECS にチェックを入れて入力ファイルを作成して、計算をしてください。

13.11.12 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。

13.11.13 Q. GAMESS, Gaussian, NWChem で計算可能な最大原子数（必要メモリ）の目安はありますか？

A. 分子サイズ、基底関数、計算内容、並列数によって必要メモリ量が変わるため、シンプルな目安はありません。
実際に計算を実行し、メモリ不足で計算が止まった場合ログファイルにどのくらい足りないかが書かれているため、その値をもとに判断するのが一般的です。

13.11.14 Q. GAMESS, Gaussian, NWChem の ESP（静電ポテンシャル）の 3 次元表示を高速化することはできますか？

A. Windows 版 Gaussian をインストールしている場合は、Cube ファイルを開いた際に出現する Cubegen ウインドウにおいて Cubegen チェックボックスにチェックを入れると、Gaussian に付属する Cubegen プログラムを使用し比較的高速に処理することが可能になります。
将来的には Winmostar 付属の cube ファイル処理プログラム（OpenCubegen）を高速化する予定です。

13.11.15 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. インプットファイルで指定したメモリ量では足りていないことを意味しています。
GAMESS キーワード設定ウィンドウの Advanced タブの$SYSTEM 欄の MWORDS の数値を大きくしてください。(MWORDS の数値)x8MB が 1CPU コア当たりの上限使用メモリ量になり、例えば MWORDS が 200 であれば 1CPU コア当たりの上限は 200x8MB=1600MB=1.6GB になります。ご使用の計算機及び並列数に合わせて MWORDS を設定してください。

13.11.16 Q. Windows 版 GAMESS をインストールした直後は問題なく利用できていたが、ある時期から計算が全て途中で異常終了するようになりました。対処方法はありますか？

A. まずは **一般的な不具合** の対処を実施してください。それでもうまくいかない場合は、次の操作を順に実行してください。

1. GAMESS のイントーラを起動 →Remove を選択 →GAMESS をアンインストール
2. Windows の設定 → アプリ → アプリと機能 →Microsoft MPI を選択 →Microsoft MPI をアンインストール
3. Winmostar インストールガイドにある、Windows 版 GAMESS インストールマニュアルの内容に従って GAMESS と MS-MPI を再インストール

特に、GAMESS 実行時に、コンソールウィンドウに「mpiexec ...(中略)... server rejected credentials」などと表示される場合はこの方法が有効な場合があります。

13.11.17 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。
Wimostar の GAMESS キーワード設定ウィンドウにおいて、COORD を UNIQUE に変更してください。

13.11.18 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。

13.11.19 Q. GAMESS の実行時に「ERROR: BAD DELOCALIZED COORDINATES GENERATED!!!」、「THERE ARE NOT ENOUGH PRIMITIVE INTERNAL COORDINATES」とログに出力され計算が異常終了します。

A. 構造最適化サイクル数を減らすため、Winmostar では通常結合や角度などの内部座標の利用を指定しますが、2 量体など複数の分子が存在する、特定の原子からの結合の数が多すぎるなどの理由により、xyz 座標から内部座標への変換に失敗して止まっています。
Wimostar の GAMESS キーワード設定ウインドウにおいて、Z-Matrix タブを選択 --> $ZMAT のチェックを外して、xyz 座標で計算を行ってください。

13.11.20 Q. GAMESS で NMR 計算を実行しようとする（RUNTYP=NMR で計算をする）とエラーが出ます。

A. GAMESS の NMR 計算は閉殻の Hartree-Fock 法のみ対応しており、その他 DFT 法等では実行できません。
また、GAMESS の NMR 計算の実行速度は遅いこともあるので、代わりに NWChem や Gaussian を使うことをお勧めします。
どうしても Winmostar から GAMESS で計算したい場合は、Setup ウインドウの Advanced タブの$SCF 欄の DIRSCF のチェックを全て外してください。
また並列計算に対応していないので並列数は 1 にしてください。
エラーで止まった際のログに詳細な指示が書かれているので、そちらも参考にしてください。

13.11.21 Q. GAMESS で Diffuse 関数を使うと SCF 計算が収束しません。

A. GAMESS Setup の Basic タブの$CONTRL 枠にある Others 欄に ICUT=11 を追記して、2 電子積分のカットオフ値を小さく (厳しく) してください。*Q.* **量子化学計算の実行中にエラーが起こるがどうしたらいいですか。** の小さな基底関数の結果を初期軌道にする方法も参照してください

13.11.22 Q. 一部の分子において、Firefly の optimaize 実行後、分子軌道 UVvis…を確認すると、「'*******' is not valid floating point value」というエラーがでます。

A. 基底関数に 6-31+G*と diffuse 関数の+が加わっているため、基底の線形従属性が大きくなっています。
そのため、分子軌道係数の値の一部が非常に大きくなり、ログ中に****と出力されます。

解決方法としては、
1. 6-31G*基底関数を使う
2. 6-31+G*を使うのであれば、Firefly ではなく GAMESS で計算する

が挙げられます。

線形従属性の処理が GAMESS には入っているため、
Firefly と GAMESS ではエネルギー値が少し異なる可能性があります。
Firefly か GAMESS どちらかで統一して、一連の計算を行ってください。

13.11.23 Q. GAMESS で構造最適化計算を実行し「THE GEOMETRY SEARCH IS NOT CONVERGED!」というメッセージが出た際の対処方法を教えてください。

A. アニメーションで構造最適化の情報を表示して、エネルギーが下がり続けていれば、構造最適化サイクル数が足りずに計算が終わっています。最終構造で再度構造最適化計算を行ってください。
ある程度大きい分子（概ね 100 原子以上）では、DLC=.T. を付けて構造最適化すると構造が大きく崩れることがあります。その場合は$MAT の Set DLC=.T.... のチェックを外して実行すると解消する場合があります。

13.11.24 Q. GAMESS のインストーラをダウンロードできません。どのようにしたらいいですか？

A. ダウンロードサイトでエラーが出て登録フォームが表示されない場合、他のブラウザで試してください。Microsoft Edge の場合は、Internet Explorer モードでアクセスし直してください。また、ダウンロードサイトのシステムが落ちていることがたまにありますので、その場合は最大一週間程度お待ちください。

13.11.25 Q. GAMESS の DFT 計算で「CONVERGED TO SWOFF, SO DFT CALCULATION IS NOW SWITCHED ON」の表示の後、収束しません。対処方法はありますか？

A. GAMESS の DFT エネルギー計算は、収束性を高めつつ計算効率を上げるため通常 3 つのステップで行います。まず Hartree-Fock 計算、続いて荒い grid での DFT 計算、最後にデフォルトもしくは入力で指定された grid での DFT 計算となります。「CONVERGED TO SWOFF, SO DFT CALCULATION IS NOW SWITCHED ON」が表示されると第 2 段階の荒い grid での DFT 計算が始まりますが、分子によっては grid が荒すぎて収束せずに、第 2 段階が収束したことを意味する「DFT CODE IS SWITCHING BACK TO THE FINE GRID」が表示されない場合があります。
第 2 段階の grid 点数を増やすため、GAMESS Keyword Setup ウィンドウの DFT タブの Others 欄に「NRAD0=99 NLEB0=302」を記入してください。

13.11.26 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。
また、64bit の Windows で 32bit の MPICH2 を使用している場合は、64bit 版を使用してください。

13.11.27 Q. NWChem の実行時に「sym_geom_project: sym_center_map is inconsistent with requested accuracy」とログに出力され計算が流れません。

A. 構造が NWChem の分子対称性判断基準からわずかに外れた場合、エラーで止まります。Winmostar メインウィンドウの [ツール]-[点群解析] を選択し、[Analyze]、その後 [Symmetrize] をクリックして正確な対称性を持った構造にするか、キーワード設定ウィンドウの Advanced タブの noautosym にチェックを入れるか、もしくは原子 1 つを少し動かして対称性を崩した構造にしてください。

13.11.28 Q. NWChem で溶媒効果を入れる方法を教えてください。

A. NWChem ワークフロー設定もしくはキーワード設定ウィンドウの Solvent タブの Solvent に溶媒名を入力してください。対応している溶媒分子は
https://nwchemgit.github.io/COSMO-Solvation-Model.html#solvents-list-solvent-keyword をご覧ください。

13.11.29 Q. NWChem の実行時に「out of memory」、「alloc failed」「ma_push failed」、「nga_create failed」、「Global memory limit unreasonable」を含む行がログに出力され計算が流れません。

A. どれも入力で指定したメモリ量では足りずに、計算が止まっています。NWChem Keyword Setup ウィンドウ Basic タブの Memory の値を大きくしてください。

13.11.30 Q. Gaussian で計算が正常に実行される時とされない時があります。

A. シングルコア版の Gaussian の場合は、2 つ以上ジョブを実行しようとすると Gaussian が強制終了します。シングルコア版の Gaussian を使い、Winmostar で 2 つ以上の Gaussian のローカルジョブを逐次実行したいときは、各ジョブの並列数（%nproc または%nprocshared）を 1 にした上で、Winmostar JM の Max Cores を 1 に設定してください。
また、シングルコア版ではない場合も、特に Windows 上で Gaussian09（g09）以前の場合は同時に複数 Gaussian を実行すると、Gaussian 側のメモリ管理等の問題により異常終了することがあります。逐次実行することで解決します。逐次実行するための手順は *Q.* **ローカルジョブにおいて、複数のジョブを同時ではなく逐次実行するにはどうしたらいいですか？** にて確認してください。

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

A. 実行した Gaussian の入力ファイルに pop=full と gfprint が抜けている場合は表示されません。
Gaussian 入力もしくは出力ファイルを Winmostar で開くと、構造だけでなく計算条件も読み込まれます。
Winmostar 以外で作成された入力もしくはその出力ファイルでは、pop=full と gfprint が設定されていないことがあるため、そのようなファイルを開いてキーワード設定をする場合、pop=full と gfprint が設定されているか確認をしてください。

13.11.32 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 ウィンドウで [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。

13.11.33 Q. 数 GB の Gaussian fchk ファイルを読み込ませて分子軌道を表示させようとするとエラーが出ます。

A. おおむね 2GB 程度の fchk ファイルまで対応しています。上限サイズは、分子サイズ、基底関数に依存します。将来的には fchk ファイルサイズの制限を解消する予定です。

13.11.34 Q. Gaussian で同位体効果を考慮した振動計算を行う方法を教えてください。

A. Gaussian Keyword Setup ウィンドウの Freq 欄を freq=readisotopes にして、Subsection 欄に次の項目を 1 行ずつ書いてください。
温度 (K) 圧力 (気圧)
1 番目の原子の質量
2 番目の原子の質量
...
n 番目の原子の質量

13.11.35 Q. GAMESS の構造最適化計算実行時に「OPTIMIZATION ABORTED. -- GRADIENT OUT OF RANGE -- MAXIMUM ALLOWED FORCE (FMAXT) 」とログに出力されて異常終了します。

A. エネルギーの原子核座標による微分値（原子にはたらく力）が大きすぎて、計算が止まっています。初期構造、電荷やスピン多重度など計算条件の設定に問題がある可能性があります。これらの入力内容が適切かどうか確認してください。

13.11.36 Q. GAMESS、NWChem で構造最適化後に計算した振動（IR、ラマン）スペクトルの初めのほぼ 0cm $^{-1}$ の 6 つのモードは何ですか？

A. 初めの 6 つ (直線分子では 5 つ) のモードは並進と回転で、理論的には振動数は 0cm $^{-1}$ です。カットオフ等の数値誤差により僅かに値を持つことがあります。振動の解析は並進と回転を除いた 3N-6(直線分子では 3N-5、N は原子数) のモードで行ってください。
なお Gaussian、MOPAC では並進と回転を除いた振動モードのみ表示されます。

13.11.37 Q. Gaussian で開殻 1 重項の計算を行うにはどうしたらいいですか。

A. Gaussian キーワード設定ウィンドウの Hamiltonian で使用したい方法名に U を付けてください。例えば B3LYP で計算したい場合は UB3LYP と記入してください。さらに Guess を mix に変更してください。

13.11.38 Q. Gaussian、GAMESS、NWChem で同じ DFT 汎関数と基底関数を使っても、エネルギーが 0.001 Hartree オーダーで異なることがあるのはなぜですか。

A. 同じ基底関数名でも、STO-NG 系や 6-31G 系の Si や第 4 周期以降の元素では、関数の値が少し異なることがあるためです。基本的には、同じソルバで計算してエネルギーなどの比較を行ってください。

13.11.39 Q. Gaussian、GAMESS、NWChem で同じ DFT 汎関数と基底関数を使っても、エネルギーが 0.001 Hartree オーダーよりも大きな桁で異なることがあるのはなぜですか。

A. d 関数以上を Cartesian 基底関数 (6d 10f) で計算するか、球面調和関数 (5d 7f) で計算するかで基底関数の数が異なり、値も異なります。Gaussian は選択した基底関数によってデフォルトの関数系が異なります。
キーワードで指定するには、Gaussian の場合、キーワード設定ウィンドウの Others 欄に Cartesian では 6d 10f、球面調和関数では 5d 7f を記入してください。GAMESS の場合、デフォルトは Cartesian で、球面調和関数にするにはキーワード設定ウィンドウの$CONTRL の ISPHER を 1 に設定してください。NWChem の場合、キーワード設定ウィンドウの Basis で cartesian もしくは spherical を選択してください。

13.11.40 Q. 遷移状態構造最適化計算を行った後の IR 計算で、複数の虚 (表示上は負) の振動モードが出た場合の対処方法はありますか。

A. 小さな虚振動モード (おおむね表示上は-50cm $^{-1}$ 程度以下) が複数ある場合、数値誤差の可能性が高いため、Gaussian では DFT 計算ではグリッド点数を増やして再計算してください。Gaussian では、Keyword Setup ウィンドウの OPT/IRC 欄を opt=(ts,noeigentest,calcfc) から opt=(ts,noeigentest,calcfc,tight) に変更して、Gaussian09 をお使いの場合はさらに Others 欄に int=(grid=ultrafile) を追加してください。GAMESS では、Keyword Setup ウィンドウの DFT タブの$DFT の NRAD と NLEB に大きな値を入力してください。
ある程度大きな値の虚振動モードの場合、よりエネルギーが低い遷移状態構造があることを意味します。IR スペクトルウィンドウの虚振動のモードを選択して、Animation ボタンをクリックしてください。全ての虚振動に対して行って、反応物と生成物につながらない振動モードについては、アクションの Coordinate(Final) をクリックして、分子表示エリアの構造からその振動モードの方向に手動で少し原子を動かして、再計算を行ってください。

13.11.41 Q. GAMESS において、「ILLEGAL EXTENDED BASIS FUNCTION REQUESTED.」と出力されて、異常終了します。

A. 選択した基底関数に対応していない元素が含まれていることが原因で止まっています。基底関数のデータベースのページを参考に、対応している基底関数を選択してください。
Basis Set Exchange

13.11.42 Q. Gaussian、GAMESS、NWChem の B3LYP は異なりますか。

A. はい。GAMESS は論文オリジナルの B3LYP で、Gaussian は独自の B3LYP です。GAMESS で Gaussian の B3LYP を使う場合、プロジェクトモードでは Method を B3LYP(same as Gaussian) を、ファイルモードでは $CONTRL の DFTTYP を B3LYPV1R に設定してください。NWChem の B3LYP は Gaussian のものと同じです。

13.11.43 Q. GAMESS と Gaussian のプロジェクトモードで SCF 計算のリスタートはどうすればいいですか。

A. GAMESS では、「継続ジョブを実行しますか」で「はい」を選択して、Keyword Setup ウィンドウの Advanced(2) タブの$GUESS の GUESS を MOREAD にして、ウィンドウ下部の Othres の Import $VEC をクリックして継続元のファイル gms.pun を選択して実行してください。gms.pun は正常終了、SCF もしくは構造最適化サイクル数が上限に達した場合に作られます。
Gaussian では、「継続ジョブを実行しますか」で「はい」を選択して、キーワード設定ウィンドウの Guess を read にして実行してください。

13.12 LAMMPS, Gromacs に関して

13.12.1 Q. これから分子動力学計算を実施してみたいのですが LAMMPS と Gromacs のどちらを使ったら良いですか？

A. 迷われているようでしたら LAMMPS をお勧めします。LAMMPS は Gromacs より低速ですが、対応する力場の種類が多く、非平衡計算のスキームを柔軟に組むことができます。仮に長時間の計算が必要になった場合は、その段階で Gromacs への移行を検討する、というのでも問題ないかと思われます。Winmostar を使うと LAMMPS も Gromacs も同じ操作感で利用することができ、比較的容易に移行することが可能です。

13.12.2 Q. 分子動力学計算の実行中にエラーが起こるがどうしたらいいですか。

A. まずは Winmostar のチュートリアルをトレースしてください。それで失敗する場合は環境構築に失敗している可能性があります。
次に、エラーに再現性があるか確認してください。再現性がない場合は、環境（ハード・ソフトのいずれかまたは両方）の問題か、乱数由来の問題であることが多いです。
次に、各成分 1 分子、電荷なしで計算してください。それでもエラーが出る場合は力場の種類も変更してください。
各成分 1 分子、電荷なしでエラーが出なかったら、電荷を設定したり分子数を増やして挙動を観察してください。
次に、長時間の計算でエラーが出る場合、平衡化の時間を長くしてください。
平衡化の過程でエラーが出る場合は、以下の方法を試してください。
- 保存量（全エネルギー、拡張ハミルトニアン）の保存を確認し、時間刻みを小さくする。(1 fs→0.5 fs→0.2 fs→0.1 fs といった形で徐々に小さくしながら安定動作する値を探す)
- 並列計算をしない。並列数を 1 にする。
- 並列計算をしない、または並列数を 1 にするのが計算時間の問題で現実的でない場合は、並列数を少しずつ減らす。
- 温度・圧力制御に Berendsen 法や速度スケーリング法を使う。
- 倍精度を使う（Gromacs の場合）
- 拘束（SHAKE 法など）を使わない。その代わり時間刻みを 0.1 fs 程度にする。

- セルサイズがカットオフ半径の 2 倍を下回る場合はソルバの実装上計算が破綻するため、分子数を大きくしてセルサイズを大きくし再度計算する。
- 計算を短いステップ数で区切り、継続を繰り返す。(特に圧力制御時に初期密度と最終密度が大きく異なる場合に有効)
- 初期密度を変更する(減らす、増やす)。
- 初速度生成時の乱数シードを変更する。
- 初期構造生成時の乱数シードを変更する。

NVT 計算までは正常に終了するが NPT 計算で破綻する場合は *Q.* **圧力制御(*NPT* 一定または *NPH* 一定)を行うと、計算が途中で破綻します。解決方法はありますか？** を参照してください。

13.12.3 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。
また、緩和の遅い分子、例えば強直であったりかさ高い分子の場合はなかなか平衡密度に達しないことがあるので、その場合は *Q. NPT* **計算で最終的に得られる密度が実験値などから予測される密度よりもかなり低くなります。どうしたらよいですか？** を参照してください。どうしても計算可能な時間内で平衡密度に達しない場合は、初期配置違いで複数計算し、その結果を平均することがあります(例えば高分子メルト中の低分子の溶媒和自由エネルギーの計算などでは数十〜百程度の初期配置違いの結果を平均することもあります)。

13.12.4 Q. MD 計算を同じ初期配置からの実行したが異なる計算結果が得られました。なぜですか？

A. MD のプログラムの内部で使われている浮動小数点演算には加減算の順番を変えたときに結果が変化する(有効数字の最後付近の桁が変化)という特性があり、通常の並列計算においては加減算の順番が通信の偶発的なタイミングに依存して変化するため、すなわち並列計算時の結果に再現性がないということがあります。また、MD で計算するような多体問題はごくわずかな値の違いが時間の経過とともに指数関数的に拡大するという性質(カオス性)を持つため、並列計算時の値の変化が、各原子の軌跡を多く変えることになります。異なる計算結果が得られたのはその変化に由来します。なお、この結果の変化は、十分な計算時間 MD 計算を実行しサンプリングを十分とった場合、計算結果の分布としては似たようなところに収束することが期待されますので、計算結果としては妥当です。

13.12.5 Q. NPT 計算で最終的に得られる密度が実験値などから予測される密度よりもかなり低くなります。どうしたらよいですか？

A. まずは、十分平衡化されているか確認し、まだ大きく温度・ポテンシャルエネルギー・圧力・密度が変化している最終であれば、より長いシミュレーション時間計算してください。
次に、芳香環を複数持つような固い分子であったり、かさ高い分子の場合には、目的の温度・圧力では平衡密度に収束するのに非常に長いシミュレーション時間が必要な場合があります。液晶や大きいモノマーの高分子では特に顕著です。これは、分子（モノマー）が固かったり大きいことで、一旦凝集した後になかなか別の配置を取りづらいことに由来しています。そのような場合、目標温度よりも高温（例えば 300 K が目標温度の場合は 600 K など）での平衡化を適宜挟むことで、密度の平衡化が大幅に加速されることがあります。
LAMMPS, Gromacs ワークフロー設定においては、Preset=12-Step Compression であったり 21-Step Compression-Decompression を使うことで簡単にそのような平衡化を設定可能です。

13.12.6 Q. 同じ温度・圧力条件の実験で観測されている相（気相、液相、固相など）とは異なる相が出現しました。なぜですか？

A. 系が明らかに平衡状態にない場合は、温度・圧力・密度・ポテンシャルエネルギーなどが落ち着くまで計算してください。それでも異なる場合は、過冷却などの準安定状態にある可能性もあります。なお、準安定状態から平衡状態に遷移させるのは容易ではない場合があります。また、安定状態（平衡状態）においても異なる場合は、使用した力場による相図が実験の相図と異なることに由来する場合もあります。これは、力場を含めあらゆる原子間力の近似計算手法が、本来とは異なる形状の Potential Energy Surface を与えるためです。
例えば液体であるはずなのに、用いている力場が与えるガラス転移温度が実験値よりも高いがためにガラス状態の計算となってしまうようなことはしばしばあります。そのため、自己拡散係数などから現在得られている状態が狙った相にあるかをモニタリングすることは重要です。

13.12.7 Q. MD 計算において SHAKE 法などによる拘束は計算結果にどのような影響を与えますか？拘束方法はどのように選んだらよいですか？

A. SHAKE 法、RATTLE 法、LINCS 法、SETTLE 法を共有結合する原子間に適用し結合長を拘束することで、時間刻みを大きく取り、同じ計算量でもより長時間の現象をより安定して観察できるようになります。安定、というのは、ハミルトニアン（全エネルギー）の保存の観点で、になります。
拘束しない場合に共有結合を表現する関数も実現象を高精度に表現しているわけではないので、安定した計算が流れているという前提のもと、算出される各種の物性に与える影響という点では、拘束する場合・しない場合のどちらも、それぞれの事情による実現象からのずれが生じています。
分子内の振動運動自体に計算の目的がない限りは、長時間安定してハミルトニアンが保存する条件を都度選択することを基本的には推奨します。
ただし、水素原子の結合は、拘束しない場合は系内で突出して高速に運動し、ハミルトニアンのドリフトの原因になりうるので、多くの場合は水素原子の結合については拘束します。

13.12.8 Q. MD 計算を実行後、アニメーションを観たり、最終構造を見ていると、分子がセルの外側に出てしまうことがあるのはなぜですか？

A. 周期境界を使用していると、分子の実体は周期境界のセルの内側に収まるべきです。
しかし、Gromacs、LAMMPS などのソルバは、平均二乗変位などを計算するために、セルの境界を分子が跨いでも、座標を折り返さずにそのまま並進移動した値でトラジェクトリを記録しています。
どちらにしても、結果解析時には適切に考慮され同じ結果が出力されますので、結果解析への悪影響はありません。
セルの外側に分子が飛び出る様子が見た目としてよくない場合は **表示** - **周期境界条件の表現形式** の設定を調整してください。

13.12.9 Q. タンパク質のような大規模な分子に [溶媒を配置/セルを構築] メニューでセルから水分子を追加してセルを作成するとセルから分子がはみ出ることがあります。

A. [表示]-[周期境界条件の表現形式] で [セルの内側に原子単位で再配置] としてタンパク質と水分子が干渉していないようでしたら、計算上は問題ありません。
見た目のだけ問題ですがタンパク質を中心にしたい場合は、溶媒を追加する前に中心付近の原子を選択して、[編集]-[座標系の取り直し]-[選択原子の位置を原点に設定] を実行して分子を中心付近に移動させてください。

13.12.10 Q. [MD]-[溶媒を配置/セルを構築] や [分子の挿入] の処理が何分経っても終わりません。解決方法はありますか？

A. [溶媒を配置/セルを構築] 機能の場合は密度を小さくしてください。分子が比較的小さいとき（概ね 30〜40 原子以内）の時は到達予想密度の 50〜75 %程度に設定してください。分子が大きいときや分子の形状によってはさらに密度を小さくする必要がある場合もあるので（数%〜10 %など）、少しずつ小さくしながら挙動を観察してください。初期密度が本来の密度から大きく外れていても、MD 計算を圧力制御付きで実行することにより最終的には適切な密度に変化していくことが期待されます。
次に、Option タブの Tolerance と Tolerance (Fixed) の両方を小さくしてください。これらの値に設定できないため、0.1 といった小さな値で試し、正常終了するようであれば少しずつ大きい値で正常終了するか試してください。ただし、これらの値を小さくした場合は原子間距離が極めて小さくなる可能性があるため、エネルギー極小化あるいは構造最適化計算で十分エネルギーが低い構造に平衡化する必要があります。

13.12.11 Q. [MD]-[自動で電荷を割り当て] メニューで「Topology file not found」というエラーが表示されます。解決方法はありますか？

A. 電荷を割り当てようとしている分子が Acpype に対応していない可能性があります。[ファイル名]_charge_tmp フォルダ以下の log ファイルや、sqm.out ファイルを確認してください。対応していない原子がある場合は、MOPAC や QM で電荷を割り当てるか、手動で入力してください。

13.12.12 Q. 力場を割り当てで処理に時間が掛かり終わりません。解決方法はありますか？

A. 特に力場の種類に GAFF, OPLS-AA/L+GAFF を選択した場合に処理に時間が掛かることがあります。これは、GAFF, OPLS-AA/L+GAFF の割当に acpype を使用しており、acpype の処理が遅いために発生しています。1 分子が 10000 原子近い高分子の場合は、5-6 時間程度待てば処理が正常終了することを確認しております。環境によってはこれよりも速い場合もあり、逆に遅い場合もあります。将来の Winmostar ではこれらの力場の割当処理の高速化に取り組むことを予定しております。

13.12.13 Q. 力場を割り当てでエラーが表示されます。解決方法はありますか？

A. 力場を割り当てようとしている分子が Acpype に対応していない可能性があります。[ファイル名]_top_tmp フォルダ以下の log ファイルや、sqm.out ファイルを確認してください。対応していない原子がある場合は、UFF や Dreiding などの汎用性のある力場をお試しください。

13.12.14 Q. ポリマーに点電荷を割り当てるにはどうしたらいいですか？

A. ポリマーは分子量が大きく、低分子で一般的に使われるような点電荷の割り当て方法を使用すると、巨大な分子の量子化学計算を実行する必要があり、それには極めて長い計算時間が必要となってしまい現実的ではありません。また、高分子は真空中で様々な配座を取り、分子全体の量子化学計算を実行すると配座の影響が大きく出てしまいますが、高分子の古典力場におけるモデルとしては、繰り返し単位間で極端に電荷が変わってほしくありません。そのため、ポリマーの場合は低分子とは異なる方法で点電荷を割り当てるのが一般的です。Winmostar のポリマービルダを使うと、繰り返し単位の状態で点電荷を割り当て、それを用いてポリマーの電荷を自動で構成します。詳細は **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** に記載されています。

13.12.15 Q. Gromacs, LAMMPS（分子動力学計算）から誘電率を計算できますか？

A. 誘電率は外場の周波数に依存した物性であり、また周波数帯ごとにメカニズムも違うため、一概にお答えすることはできません。

Winmostar の Gromacs, LAMMPS から計算される誘電率は、分子内分極が時間変化しない前提での、分子の配向に由来する成分です。

そして、その中でも、分子動力学計算のシミュレーション時間内における系全体の双極子モーメントの揺らぎから計算される、無限に遅い低周波の極限の値となります。

ポリマーのように分子量が大きく緩和が遅い物質の場合はシミュレーション時間内に観測できる範囲での情報しかわからないため注意が必要です。

Winmostar の Quantum ESPRESSO から計算される誘電関数は、原子座標が固定された状態での電子の分極に由来する高周波成分の誘電関数です。

比較対象としている誘電率の実験値の取得方法や、材料の性質、研究目的を考えたうえで、計算をプランニングする必要があります。

なお、弊社の有償サポートでプランニングのお手伝いをすることが可能です。

13.12.16 Q. 界面ビルダで作成した構造から MD 計算を実行しようとすると、力場の割り当てが失敗したり MD 計算破綻します。解決方法はありますか？

A. 接合箇所の間隔が短いと、両層の分子が衝突し、望まない共有結合が原子間距離から判定され生成されてしまったり、MD 計算開始時に大きな力が働き MD 計算が破綻することになります。平衡化に時間が掛かってしまいますが、界面ビルダの [Direction]-[Interval] の値を大きくし、長い時間を掛けて平衡化をするのが一番良い方法となります。

13.12.17 Q. 圧力制御（NPT 一定または NPH 一定）を行うと、計算が途中で破綻します。解決方法はありますか？

A. まず、気相や気相中に他の相が分散しているような、分子間の相互作用が極めて弱い状況では、圧力制御は安定しにくいため、圧力制御を使わない方法も試してください。次に、破綻した計算において密度の時間変化を確認し、何が起こっているか確認してください。また、圧力制御を行う前に、密度一定で十分エネルギー・温度・圧力が平衡化している必要があります。密度一定での平衡化が終わった時点で、圧力（の平均値）は 0 またはマイナスである方が望ましいです。密度一定での平衡化終了時点で圧力の値が大きいと、圧力制御を開始した直後にシステムサイズが急激に変化します。密度一定での平衡化終了時点での圧力を小さくしたい場合は、初期密度を小さくしてください（最終的な密度のおおよそ 50 %程度を目安に、場合によってはそれより大きく、あるいは小さくする）。それでもなお解決しない場合は、(1) 圧力制御を Parrinello-Rahman(Nose-Hoover) 法ではなく Berendsen 法に切り替える、(2) 圧力制御の時定数を大きくする、(3) 圧力制御を入れた計算を短く何回かに分割する、ということで改善するかと思われます。

13.12.18 Q. LAMMPS, Gromacs で液体（有機物）-固体（無機物）間の相互作用パラメータをどのように決めたらいいですか？

A. まず、着目している液体-固体界面について分かっている実験事実や関連研究について可能な限り情報収集します。特に、表面の原子レベルの構造（ミラー指数、官能基など）や化学的性質（濡れ性や、疎水的か親水的かといった大雑把なもの）が分かることが望ましいです。

LJ パラメータと電荷の値が適切な関連研究の文献に載っている場合は、その値を使うのがベストです。
Winmostar では次のように値を設定します。
- 電荷については、一度 mol2 形式で保存し、電荷の値を論文の値に書き換える。
- LJ パラメータについては、[力場を割り当て] 機能で [Exception] から各元素の値を入力します。

適切な値が載っている文献はなかったが、ある程度化学的性質が分かっている場合は、電荷、LJ パラメータを何通りか変えてシミュレーションを実行し、計算結果を比較して妥当と思われるパラメータを採用します。

表面の原子レベルの構造しか分かっていない場合は、第一原理計算（Quantum ESPRESSO）を併用してパラメータを決めます。
電荷の決定には、Quantum ESPRESSO の Lowdin 電荷機能を流用する場合もあります。ただし、Lowdin 電荷を使う場合は電荷の合計値が 0 とならないため値の微調整（全体的にシフトさせるなど）が必要です。また、Lowdin 電荷では分極が過大評価されることもあり注意が必要です。
LJ パラメータについては、既知のパラメータ（Dreiding, UFF, CLAYFF など）を使うか、第一原理計算から Force Matching などのアルゴリズムを用いて算出します。

このように液体（有機物）-固体（無機物）間の相互作用パラメータが複雑となっているのは、以下の事実に由来します。

1. 古典 MD では原子位置に相互作用パラメータ（epsilon, sigma, 電荷）が依存しないという仮定を置くが、有機物-無機物界面系では有機物-有機物系に比べ、その近似が大きな誤差を生じる。
2. 現実のデバイス中の無機物表面は酸化膜などに覆われているが、実験観察も容易ではなく、原子解像度で正確にモデリングすることが難しい。

13.12.19 Q. Gromacs を実行すると「There is no domain decomposition for 49 ranks that is compatible with the given box and a minimum cell size of...」というエラーが出ます。どのように対処したらいいですか？

A. 多くの MD シミュレーションソフトウェアは並列計算時にシミュレーションセルを分割し、分割後の領域（小領域）を各プロセスに割り当てて計算します。Gromacs（および他の主要なソフトウェア）はこの小領域の各辺が非結合相互作用（LJ や Coulomb の近距離成分）のカットオフ半径を下回れないような設計にしています。今回のエラーは小領域の各辺がカットオフ半径を下回ったことを意味します。対処方法としてはいくつかありますが、基本的には分子数（原子数）を増やすか、エラーが出ない並列数まで落として計算することになります。なお、限界まで並列数を上げたいという要望があるかと思いますが、実際には小領域がある程度以上小さくなると演算量に対し通信量が増え並列効率が著しく低下するため、実用上はエラーが出ないギリギリ程度の並列数での運用が最適に近いことが多いです。

13.12.20 Q. Gromacs の最終構造やアニメーションを読み込んで取得した構造や、それに何かしらの編集を行ってから再び MD 計算を実行すると力場の割り当てが失敗したり MD 計算が破綻します。解決方法はありますか？

A. Gromacs の不具合により分子が分離している可能性があります。分子が分離しているか否かは、[選択]-[分子種によるグループ選択] を表示し、想定していない成分が含まれているかを確認することで判断できます。分離していた場合は *Gromacs* **のトラジェクトリを読み込んだ構造または、最終構造において、本来繋がっているべき分子がバラバラに表示される。** をご参照ください。

13.12.21 Q. Gromacs において最終構造やアニメーションを読み込むと分子がバラバラに表示されることがありますがなぜですか？

A. *Gromacs* **のトラジェクトリを読み込んだ構造または、最終構造において、本来繋がっているべき分子がバラバラに表示される。** をご参照ください。

13.12.22 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 法実行ウィンドウの [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 法実行ウィンドウの [Options] で設定してください。

13.12.23 Q. LAMMPS のログに「Out of range atoms - cannot compute PPPM」というエラーメッセージが出力され計算が異常終了します。対処方法を教えてください。

A. そのメッセージは一般的な意味での MD 計算の破綻の際に表示されます。 *Q.* **分子動力学計算の実行中にエラーが起こるがどうしたらいいですか。** を参照してください。

13.12.24 Q. 特定原子の軌跡をプロットする方法を教えてください。

A. **アニメーション操作エリア** の Options→Tools→Draw Path を使用してください。または、以下のように操作してください。
1) アニメーションを表示
2) 分子表示エリアで軌跡を描画したい原子をクリック
3) アニメーション操作エリアで [Custom Plot] をクリック
4) [X axis] の 2 番目の項目をチェックし、「Atomic position (x)」を選択（適宜適切な方向を選択）
5) [X axis] の [Apply] をクリック
6) [Y axis] の 2 番目の項目をチェックし、「Atomic position (y)」を選択（適宜適切な方向を選択）
7) [Y axis] の [Add] をクリック
8) [Y axis] の「Atomic position (y)」以外のチェックを外す
9) グラフの下の [X Axis] と [Y Axis] の [Autoscale] を外し [Min] と [Max] を適宜設定
なお、以上の操作を簡略化した機能を開発予定です。

13.12.25 Q. 散逸粒子動力学（DPD）計算で直観的とは異なる結果が得られました。なぜでしょうか。

実際の分子集合体を DPD モデルで近似する道筋は一通りではなく、そこが不適切だったことが考えられます。また、DPD 粒子間の相互作用はかなり大胆にモデル化されており、表現したい系がそもそも DPD の表現力を超えていることも考えられます。DPD モデル含め粗視化 MD モデルの構築は個別性が極めて高く対処療法的な提案は根本の解決につながらないことが多いため、基本的に Winmostar のサポートとしては大元の研究目的を伺うところから含めた個別コンサルティングとして対応させて頂きます。

13.13 Quantum ESPRESSO, OpenMX に関して

13.13.1 Q. 手順通り Quantum ESPRESSO の擬ポテンシャルファイルをインストールしたが認識されません。

A. 拡張子が.UPF の擬ポテンシャルファイル（例えば `O.pw-mt_fhi.UPF` 、 `Au.pbe-dn-rrkjus_psl.0.1.UPF` など）を Quantum ESPRESSO のインストールフォルダの下の pseudo フォルダ（デフォルトでは C:\Program Files\Quantum ESPRESSO 64-bit 5.2.1pseudo など）にコピーしてください。ただし、旧 Internet Exproler などのブラウザで UPF ファイルをダウンロード・保存すると、拡張子が勝手に変更されたりと不具合が報告されているので、Edge や Chrome などのブラウザも試してください。

13.13.2 Q. Quantum ESPRESSO の擬ポテンシャルファイルの探し方が分かりません。どのように探したらいいですか？

A. Windows 版 Quantum ESPRESSO インストールマニュアル にて紹介しています。

13.13.3 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。
nosym=.True. に変更して計算が流れる場合は、原子配置の対称性の検出に由来した不具合が発生していることがあります。
並列数を減らすと計算が正常に流れる場合もあります。diagonalization(david, cg, rmm-*など) を変更することで解決することもあります。この現象は、Quantum ESPRESSO をビルドしたコンパイラ、MPI、数値ライブラリの種類によって変化するため、リモートジョブの場合は必要に応じてこれらの設定を変えて Quantum ESPRESSO を再ビルドすることも有用です。Quantum ESPRESSO キーワード設定ウィンドウの Options タブの Options for executable に並列の分配方法 (-nk, -nt, -nb, -nd) を記入することで改善することもあります。

13.13.4 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「third order derivatives not implemented with GGA」と表示され計算結果を取得できません。

A. GGA でない擬ポテンシャルを選択することで解消します。

13.13.5 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。
・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。その上で本当に収束しない傾向にあるかチェックする。
・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。
・Hexagonal 結晶で K_POINTS のシフトを行っていたらシフトを外す。
・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。
・界面（吸着）モデルなら表面モデルのみ、表面モデルならバルクモデル、欠陥モデルならバルクモデル、といった形でより単純なモデルで計算が収束するか確認する。
・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、スラブ表面の終端構造など）がある場合は、違う配置を試す。
・スラブの場合は終端構造の切り出し方や修飾を再考する。
・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。
・構造最適化の打ち切り誤差を小さくしすぎると、SCF 計算の打ち切りにより残るノイズを拾い本来生じえない構造に変化し SCF が収束しなくなることがあるので、構造最適化の打ち切り誤差を SCF 計算の打ち切り誤差に応じて適切な大きさに設定する。

次に試すこと：
・mixing_mode, diagonalization を調整する。
・mixing_beta を小さくする。
・nbnd を増やす。
・擬ポテンシャルファイルの種類を変える。
・スピン分極の初期値を調整する。（原子単位または系全体）
・スラブモデルなどで系全体がダイポールモーメントを持つ可能性がある場合は、ダイポール補正の使用か、ESM 法の使用か（bc=1）、表面組成の変更を検討する。
・U パラメータを使っている場合は U=0 から徐々に増やして挙動を確認する。
・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）。

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。

計算精度との兼ね合いで試すこと：
・スピン分極計算の場合はひとまずスピン分極なしで収束するか確認する。
・smearing を調整する（使用有無・種類・幅）。
・SCF の収束パラメータを緩くする。

13.13.6 Q. Quantum ESPRESSO で、電子密度、スピン密度、ポテンシャルの 3 次元分布を可視化できません。

A. まずは Winmostar チュートリアルの Quantum ESPRESSO 基礎編をトレースし、小さいシステムサイズでそれらが表示できるか確認してください。できない場合は *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。** を参考に環境を再構築してください。チュートリアルは正常動作するが動かない場合は、まず cube ファイルが作業フォルダに生成されているか確認してください。cube ファイルが生成されていた場合は Winmostar Viewer の問題に由来する場合があるので *Winmostar Viewer* **でサイズが大きい** *cube* **ファイルを開けない。** を参考に対処してください。

13.13.7 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 **固体** → *Quantum ESPRESSO* **メニュー** を参照）。

13.13.8 Q. Quantum ESPRESSO の SCF 計算が出力ファイル（.pwout または.out）に「fixed occupations and lsda need tot_magnetization」と表示され異常終了します。どのように解決したらいいですか？

A. occupations に smearing を指定するか、starting_magnetization ではなく tot_magnetization を指定してください。

13.13.9 Q. Quantum ESPRESSO の構造最適化計算（vc-relax）が出力ファイル（.pwout または.out）に「smooth g-vectors missing !」と表示され異常終了します。どのように解決したらいいですか？

A. pwout または out ファイルの最後に出力されている構造を用いて再計算してください。Winmostar GUI 上では、構造最適化のアニメーションを表示し、最終構造を表示した状態で新規にジョブを作成してください。

13.13.10 Q. Quantum ESPRESSO の SCF 計算が出力ファイル（.pwout または.out）に「charge is wrong」と表示され異常終了します。どのように解決したらいいですか？

A. まず *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。** の手順を試してください。
「charge is wrong」の直前に「WARNING: integrated charge= ..., expected= ...」とログに表示される際は、電荷あるいはスピン分極計算の設定がモデルに対し適切でない可能性があるので、tot_charge, nspin や starting_magnetization または tot_magnetization を適宜設定してください。例えば欠陥や表面モデルなどでシミュレーションセル内の電子数が奇数の場合は nspin=2, tot_magnetization=1 と設定することが考えられます。
それでも解決しない場合は、Quantum ESPRESSO キーワード設定ウィンドウで occupations が smearing になっていることを確認し、必要に応じて ecutrho を大きめ（400 Ry など）、k 点分割数を大きめ（徐々に増やしていく）に設定してください。

13.13.11 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。

13.13.12 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。

13.13.13 Q. Quantum ESPRESSO を用いて Phonon 計算に失敗し、計算結果を取得できません。

A. まずは、Phonon 計算を実行せず、同じ擬ポテンシャルファイル、その他計算条件を使用して SCF 計算が正常終了することを確認してください。次に、working directory（末尾が_qe_data のフォルダ）の中の ph.out(Phonon 計算モジュール ph.x の出力ファイル) を確認してください。そこに「The phonon code with US-PP and raman or elop not yet available」と書かれている場合は、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。擬ポテンシャルファイルを探す際には *Q.* **計算したい元素に対して、*Quantum ESPRESSO* 向けのノルム保存かつ *LDA* 汎関数擬ポテンシャルファイルがデフォルトでインストールされる擬ポテンシャルファイルの中からみつかりません。どのように探したらよいですか？** も参考にしてください。同様に、PAW ポテンシャルを利用している場合もラマン計算などがサポートされていないので、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。対称性に起因するエラーが発生している場合は、[固体]-[対称性を考慮して結晶構造を調整] を実行してから Phonon 計算を実行してください。

13.13.14 Q. 計算したい元素に対して、Quantum ESPRESSO 向けのノルム保存かつ LDA 汎関数擬ポテンシャルファイルがデフォルトでインストールされる擬ポテンシャルファイルの中からみつかりません。どのように探したらよいですか？

A. こちらの DB にはノルム保存かつ LDA 汎関数の擬ポテンシャルファイルが比較的多く置かれています。この擬ポテンシャルファイルに限りませんが、計算時に使用するカットオフエネルギーや k 点数は都度検証してください。

13.13.15 Q. フェルミ面を出力しようとしてもそれらしきものが表示されません。

A. まず、可能なら対象の物質が金属であることを確認してください。次に、状態密度も出力し、フェルミエネルギーにおいて状態密度が 0 でないことを確認してください。

13.13.16 Q. Quantum ESPRESSO（バンド計算）から誘電率を計算できますか？

A. *Q. Gromacs, LAMMPS*（分子動力学計算）から誘電率を計算できますか？ を参照してください。

13.13.17 Q. Quantum ESPRESSO で汎関数の種類はどのように設定しますか？

A. Quantum ESPRESSO では、汎関数ごとに擬ポテンシャルファイルが作られるので、基本的には擬ポテンシャルファイルを選んだ時点で汎関数が決定されます。一部の汎関数（HSE、vdw 汎関数など）は、ベースとなる汎関数（例えば HSE の場合は PBE）で作られた擬ポテンシャルファイルを選択した上で、input_dft キーワードを使用して汎関数の設定を上書きします。

13.13.18 Q. Quantum ESPRESSO でセルサイズの構造最適化を行うと最終構造のエネルギーで不連続的な変化をしたりエネルギーが増加するのはなぜですか？

A. エネルギーの変化が最後にわずかに不連続になるのは、 Quantum ESPRESSO が、Pulay 圧力に起因する問題を避けるために、最後の計算だけ利用する平面波セットを取り直しているからです。
このエネルギーの飛びは、カットオフエネルギーを大きくすることである程度軽減できます。
初期構造から最終構造が大きく異なる場合は、続けて再度構造最適化計算を実行します。

13.13.19 Q. Quantum ESPRESSO が原子数の少ない系では正常終了しますが大きい系では「cannot allocate ...」などのエラーとともに異常終了します。どんな対処法がありますか?

A. QE 公式ドキュメントのメモリ使用量に関する FAQ を参考にしてください。

13.13.20 Q. Quantum ESPRESSO で Projected DOS(PDOS) に出現する Total DOS と Density of States(DOS) に出現する DOS の値が異なるのはなぜですか？

A. Quantum ESPRESSO で PDOS は平面波基底で得られた電子状態を原子基底に射影された上で計算されるのですが、この射影が完全ではないことが両者の違いの原因となります。Quantum ESPRESSO に限らず平面波基底の DFT コード一般の性質となります。

13.13.21 Q. Quantum ESPRESSO で Hubbard U を設定して構造最適化すると「NR-step length unreasonably short」というエラーメッセージとともに異常終了します。どのような対処法がありますか？

A. Quantum ESPRESSO のバージョンが 5 系列の場合は Hubbard U の force 計算が実装されておらずこのエラーが発生します。そのため Quantum ESPRESSO のバージョンを 6 以降にすると解決します。

13.13.22 Q. Quantum ESPRESSO 6.6 以前と以降で SCF 計算の収束に掛かるサイクル数が大きく変化しますがなぜですか？

A. Quantum ESPRESSO 6.6 以降で diago_david_ndim のデフォルト値が 4 から 2 に変更されたことが一つの理由です。QE6.6 以降でも diago_david_ndim を明示的に 4 に設定するとそれ以前と似たような挙動になります。

13.13.23 Q. Quantum ESPRESSO でハイブリッド汎関数 (HSE など) を使うとバンド構造が崩れます。対処方法はありますか？

A. 残念ながら Quantum ESPRESSO 本体の機能としてバージョン 7.1 現在ではハイブリッド汎関数（混成汎関数）でのバンド構造計算がサポートされていません。外部モジュール（Wannier90 など）を用いたポスト処理により計算することが可能ですが、Winmostar (V11.6.4 現在) ではそのようなポスト処理はサポートされていませんので、ユーザ様ご自身で Winmostar の出力結果に対してポスト処理を実施して頂く形となります。

13.13.24 Q. QuantumESPRESSO にてハイブリッド汎関数 (HSE など) を使うと DOS の表示が崩れたり、バンドギャップが文献値よりも過大になってしまいます。対処法はありますか。

A. nqx1/2/3 の値を k 点数に対して小さくしすぎないことです。目安としては k 点数の 7 割を下限として設定してください。加えて、DOS plot の k-point spacing を pw.x の k-point spacing の値と揃えます。これら対処をすることで所望の DOS が得られます。

13.13.25 Q. 系のモデリング中や、計算結果を読み込んだ際に、不要な結合が表示されます。または結合が表示されません。どのように対処したらいいですか？

A. こちらの *FAQ* を参照してください。

13.13.26 Q. Quantum ESPRESSO のワークフロー設定やキーワード設定をする際にプリミティブセルに変換しなくても、計算実行時にプリミティブセルに変換されてしまいます。

A. 「Use Bravais-lattice index」あるいは「Set ibrav = N and celldm」にチェックを入れないようにしてください。

13.13.27 Q. 第一原理計算（Quantum ESPRESSO など）において、量子化学計算（GAMESS, Gaussian など）のような計算から得られた振動スペクトル（IR、ラマン）を実験値に合わせるようなスケーリングファクターは提案されていますか？

A. 提案されていないかと思われます。理由としては、量子化学計算（ガウス基底）のパラメータがハミルトニアン（汎関数含む）と基底関数程度であるのに対し、第一原理計算（平面波基底擬ポテンシャル法）では多数のパラメータがあり、それらを考慮した汎用的なスケーリングファクターを提案しづらいためです。上手くいく保証はありませんが、実験値と計算値を比べられる状況にあるようでしたら、特定の擬ポテンシャル、k 点密度、カットオフエネルギー、汎関数の組み合わせについて各自でスケーリングファクターを構築するということは考えられます。

13.13.28 Q. OpenMX で MPI を有効にしてローカルマシンで計算を実行すると、tcp_peer_send_blocking: send() to socket 12 failed: Transport endpoint is not connected というエラーが表示されます。

A. Cygwin の OpenMPI 特有の問題で、Windows の [設定]-[ネットワークとインターネット]-[アダプターのオプションを変更する] において使用していないネットワークアダプタを無効にしてください。また、OpenMX はローカルマシンにおいては OpenMP で計算することを推奨します。

13.13.29 Q. OpenMX でセルサイズの変化を伴う構造最適化計算を実行した後、SCF.Restart=On を設定して継続ジョブを実行すると、標準出力に Failed (3) in reading the restart files, <Restart> Could not find restart files と表示されます。

A. そのエラーメッセージは、リスタートファイルにおける電荷密度のメッシュ数がこれから計算しようとするメッシュ数と異なっていることを示します。構造最適化計算においてセルサイズが大きく変化する場合はこのような事象が起こり得ます。このような場合は、構造最適化計算の後に改めて SCF 計算を実行する必要があります。

13.14 アドオンに関して

13.14.1 Q. 溶解度パラメータ計算モジュールを用いてポリマーのハンセン溶解度パラメータを計算する際に、ポリマーの繰り返し構造（モノマー）の取り方の違いで出力される値が変化してしまう。

A. 実装されている原子団寄与法のアルゴリズムのために発生しています。原子団を探索する際には、一番大きな原子団から探索されるようになっています。重要そうな官能基は繰り返し単位の中に入れておくことをお勧めします。

13.14.2 Q. 溶解度パラメータ計算モジュールを用いて取得したハンセン溶解度パラメータの値が、文献値と大きく異なります。

A. 溶解度パラメータ計算モジュールは、各種の文献値を学習データとしてニューラルネットワークで学習された原子団寄与法を用いてハンセン溶解度パラメータを出力しています。そのため、文献値と全く同じ値を返すわけではありません。また、文献によっては溶解度パラメータの単位が異なりますので、その点にご注意ください。

Bibliography

[Hofmann2000] D. Hofmann, L. Fritz, J. Ulbrich, C. Schepers and M. Bohning, Macromol. Theory Simul., 9 (6), (2000), 293–327.

[Larsen2011] G.S. Larsen, P. Lin, K.E. Hart and C.M. Colina, Macromolecules, 44 (17), (2011), 6944-6951.

[Hofmann2000_2] D. Hofmann, L. Fritz, J. Ulbrich, C. Schepers and M. Bohning, Macromol. Theory Simul., 9 (6), (2000), 293–327.

[Larsen2011_2] G.S. Larsen, P. Lin, K.E. Hart and C.M. Colina, Macromolecules, 44 (17), (2011), 6944-6951.

[Rappe1992] A.K. Rappe, C.J. Casewit, K.S. Colwell, W.A. Goddard III and W.M. Skiff, J. Am. Chem. Soc., 114 (1992), 10024–10035.

[Garberoglio2012] G. Garberoglio, J. Comp. Chem., 33 (2012), 2204-8.

[2018CODATA] E. Tiesinga, P. J. Mohr, D. B. Newell, B. N. Taylor (2019), "The 2018 CODATA Recommended Values of the Fundamental Physical Constants" (Web Version 8.1). Database developed by J. Baker, M. Douma, S. Kotochigova. Available at http://physics.nist.gov/constants, National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg, MD 20899.

[Cordero2008] B. Cordero, V. Gomez, A. E Platero-Prats, M. Reves, J. Echeverria, E. Cremades, F. Barragan, S. Alvarez, Dalton Trans., (2008) 2832-2838.

[Pyykko2008] P. Pyykko, M. Atsumi, Chem. Eur. J., 15 (2009) 12770-12779.

[Mantina2009] M. Mantina, A. C. Chamberlin, R. Valero, C. J. Cramer, D. G. Truhlar, J. Phys. Chem. A, 113 (2009) 5806-5812.

[Rahm2016] M. Rahm, R. Hoffmann, N. W. Ashcroft, Chem. Eur. J., 22 (2016) 14625-14632.

[NIST966] Periodic Table: Atomic Properties of the Elements (Version 14), NIST SP 966. https://physics.nist.gov/pt/