



Winmostar V11 ビギナーズガイド

V11.3.2

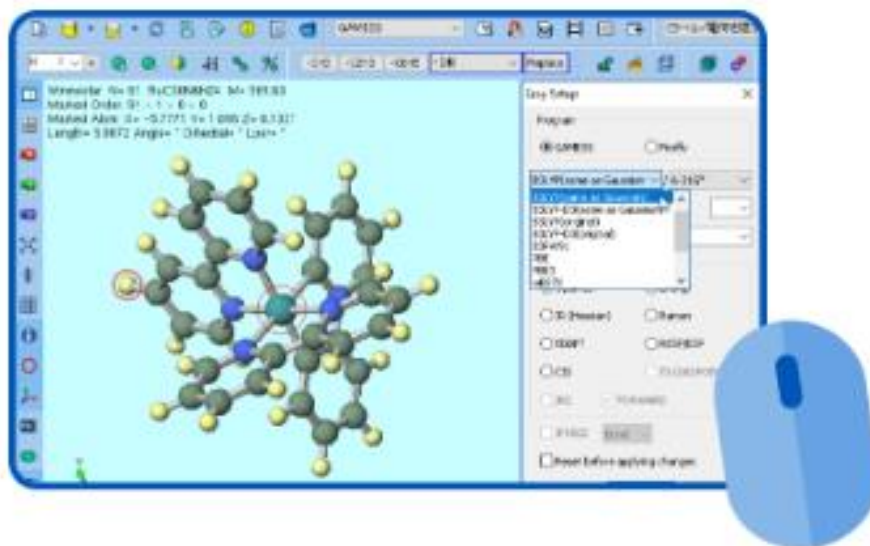
2023年11月11日 株式会社クロスアビリティ

本書について

- 本書では、Winmostarを初めて使う人を対象に、その導入手順と基本操作を紹介します。
- 不明な点がある場合や本書の通りに動かない場合はまず、随時更新されているよくある質問 <https://winmostar.com/jp/faq/> をご確認ください。
- 本書の著作権は株式会社クロスアビリティが有します。株式会社クロスアビリティの許諾なく、いかなる形態での内容のコピー、複製を禁じます。

Winmostarとは

- Winmostar（ウインモスター）は、量子化学計算、分子動力学計算、固体物理計算などのシミュレーション環境を提供する統合GUIソフトウェアです。
- 量子化学計算、分子動力学計算、固体物理計算のプログラム（ソルバ）をバックエンドとし、それらのプリ・ポスト処理、ファイル・プロセスの管理、データ可視化機能を提供します。対応するソルバにはGAMESS、Gaussian、LAMMPS、Quantum ESPRESSOなどがあります。
- 詳細は[Winmostar公式HP](#)または[製品パンフレット](#)をご確認ください。



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のセットアップ方法

- 3通りの方法から選択してください。
- ① [Winmostar V11サポート インストール・設定作業代行](#)を利用する（有償）
- ② [Winmostarインストール済みのPC](#)を購入する
- ③ 自分でインストールする（**無料**）
 - インストール方法 <https://winmostar.com/jp/installation/>の方法に従い、Winmostarだけでなく各種ソルバもインストールします。
 - **安定版最新バージョン**のWinmostarのインストールを推奨します。

(1) **安定版最新バージョン**または**開発版最新バージョン**のWinmostarインストーラをダウンロードします。

※動作環境は[こちら](#)でご確認ください。

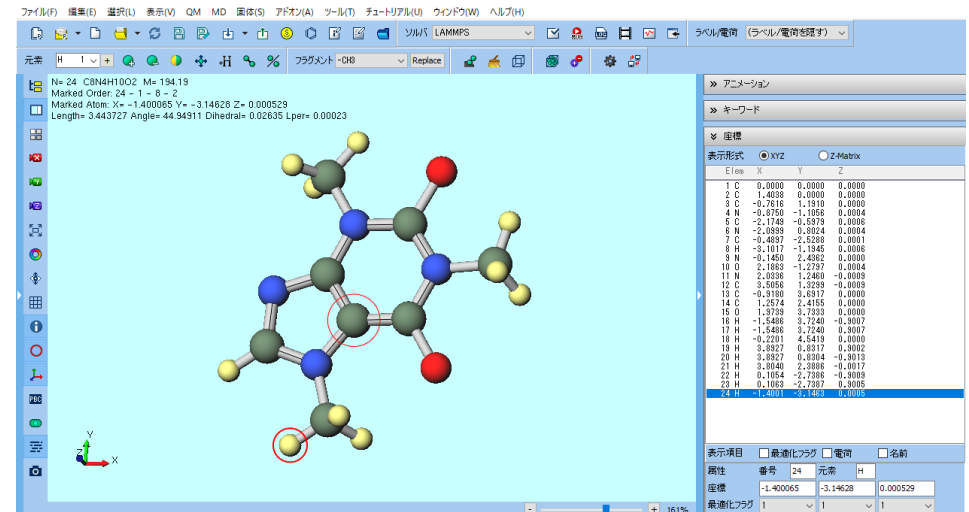
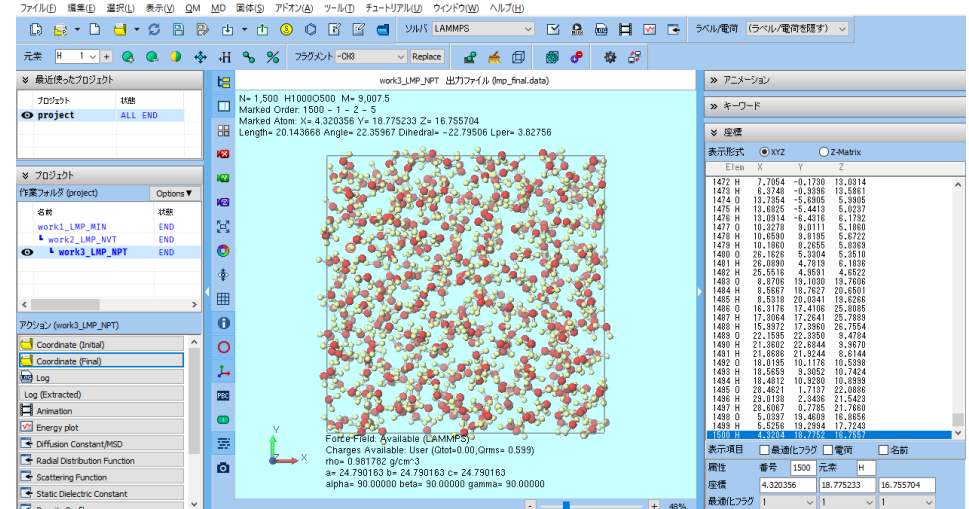
※Winmostarが起動している場合は、あらかじめ終了しておきます

Winmostarの動作モード

- プロジェクトモード (V11新機能) では、ユーザは個々のファイルを意識することなくジョブを管理できます。
無償版以外のユーザにはこのモードを推奨します。

※現時点 (2023年4月) で未対応のソルバ (OpenMX, FDMNESなど) に関しては順次対応予定です。

- ファイルモードでは、ユーザは個々のファイルを明示的に作成、管理します。操作方法はV10以前と一緒です。
無償版のユーザ、プロジェクトモードに非対応のソルバの場合はこのモードを使います。
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する場合もこのモードを使います。



各動作モードの操作フローの違い

プロジェクトモード

- プロジェクトを作成する
- 分子・原子構造をモデリングする
- 計算条件を設定する
- 並列数、使用するマシンを選択する

- ジョブを開始する
- ジョブが正常終了の通知が出るまで待つ

- 取得したい情報の種類と、
対象のジョブを選択する

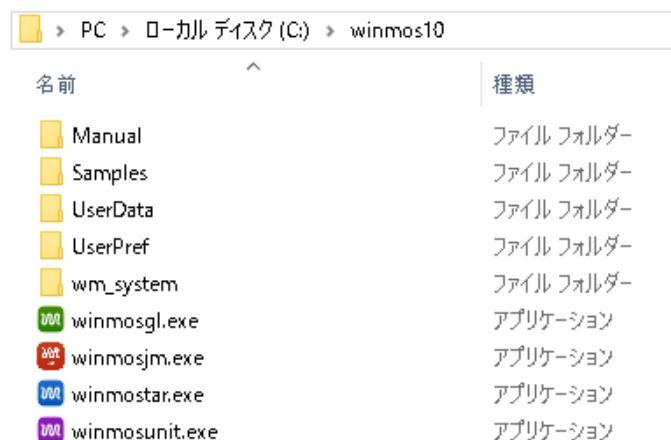
ファイルモード

- 分子・原子構造をモデリングする
- 計算条件、並列数を設定する
- 使用するマシンを選択する
- 個々の入力ファイルを保存する
- ジョブを開始する
- 出力ファイルの内容を精査しジョブの
正常終了をユーザが判断する

- 取得したい情報の種類と、
取得に必要な個々のファイルを選択する

Winmostarのファイル構成

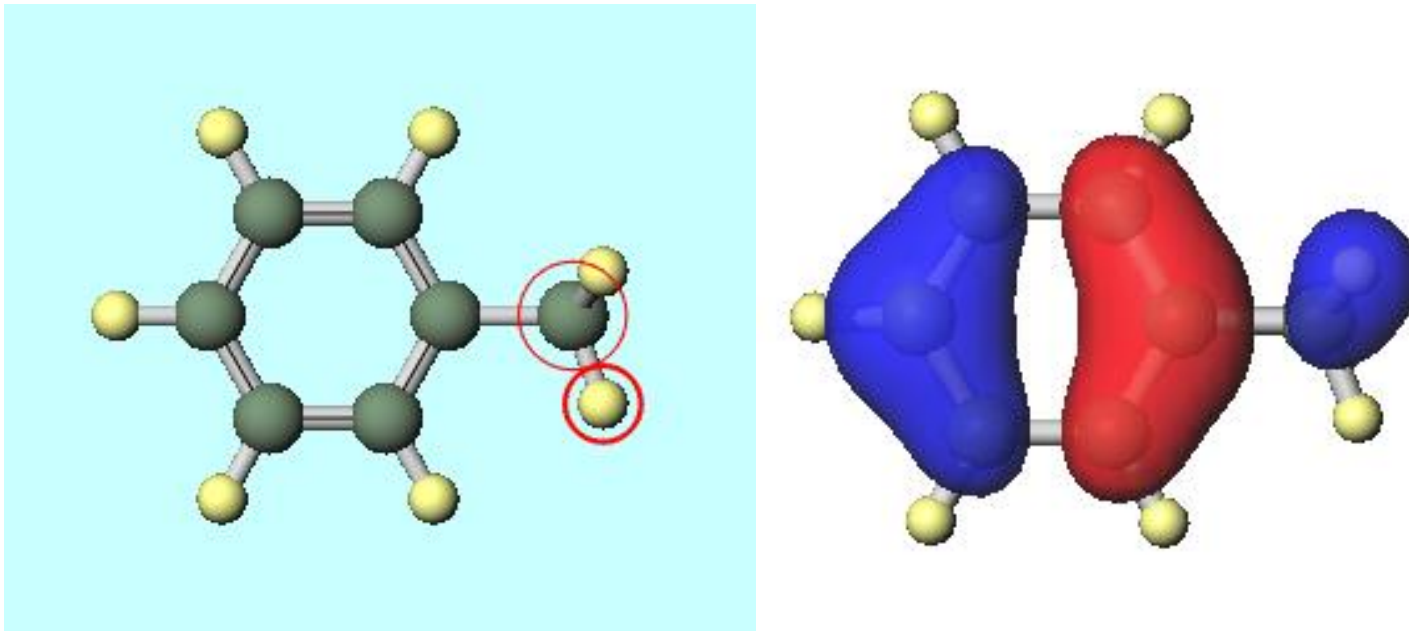
- Winmostarをインストールしたフォルダの内容は以下の通りです。（一部のみ記載）
 - winmostar.exe : Winmostar本体のアプリ (Winmostar)
 - winmosjm.exe : ローカルジョブを管理するアプリ (Winmostar Job Manager)
 - winmosgl.exe : 分子軌道などを表示するアプリ (Winmostar Viewer)
 - winmosunit.exe : 数値の単位を変換 (Winmostar Unit Converter)
 - UserPref¥ : Winmostarのユーザ設定を収めたフォルダ
 - UserData¥ : 計算データのデフォルトの保存先となるフォルダ
 - Samples¥ : サンプルデータを収めたフォルダ
 - Manual¥ : マニュアル類を収めたフォルダ



| 名前 | 種類 |
|----------------|-----------|
| Manual | ファイル フォルダ |
| Samples | ファイル フォルダ |
| UserData | ファイル フォルダ |
| UserPref | ファイル フォルダ |
| wm_system | ファイル フォルダ |
| winmosgl.exe | アプリケーション |
| winmosjm.exe | アプリケーション |
| winmostar.exe | アプリケーション |
| winmosunit.exe | アプリケーション |

例題：トルエン分子のMO計算

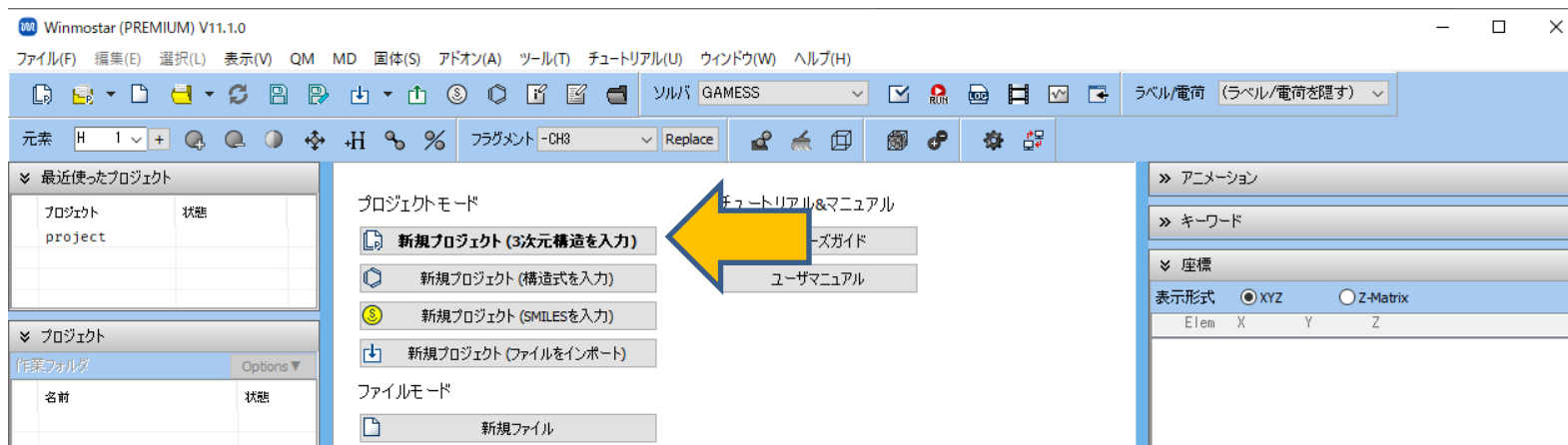
- 例題として、孤立したトルエン分子の分子軌道を計算します。
 - ここでは半経験的量子化学計算のソルバであるMOPACを使用します。
 - プロジェクトモードの手順 (P.9～) とファイルモードの手順 (P.16～) を紹介します。



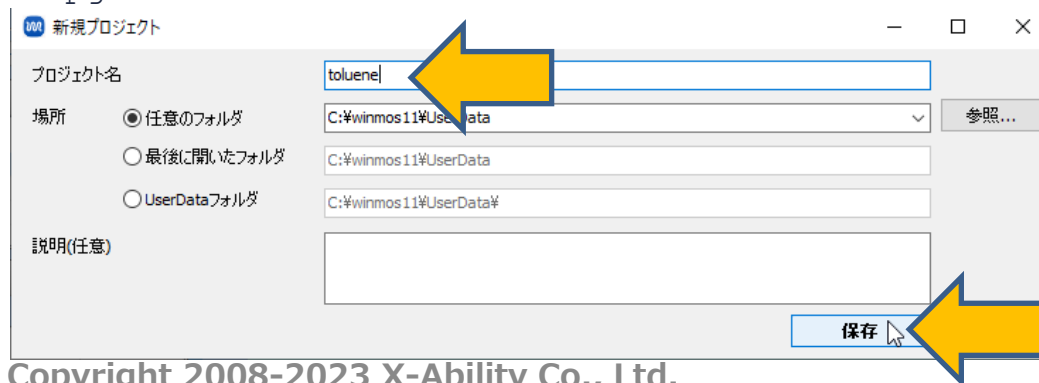
【プロジェクトモード】 Winmostarの起動

無償版をご利用の方はプロジェクトモードを使えないのでP. 15に進んでください。

- winmostar.exeを起動し、初期画面が出現したらプロジェクトモードの新規プロジェクト（3次元構造を入力）をクリックしてください。



- プロジェクト名に「toluene」（半角英数字）と入力して**保存**をクリックしてください。
 - toluene.wmpjdataフォルダが作成され、このプロジェクトに関するファイルが収められます。その下にtoluene.wmpjが作成され、このプロジェクトの主要な情報が出力されます。（詳細は[こちら](#)）



【プロジェクトモード】メインウィンドウの構成

- 分子表示エリアと座標表示エリアに**C原子（緑）**と**H原子（黄）**が結合した構造が出現します。

プロジェクト表示エリア
現在のプロジェクトで実行したジョブの情報が表示される

座標表示エリア
分子表示エリアに表示中の分子構造の座標が表示される

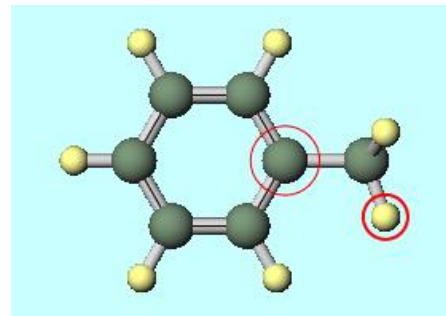
分子表示エリア
編集集中の原子・分子構造が表示される

| Elem | X | Opt | Y | Opt | Z | Opt |
|------|--------|-----|--------|-----|--------|-----|
| 1 C | 0.0000 | 1 | 0.0000 | 1 | 0.0000 | 1 |
| 2 H | 1.1000 | 1 | 0.0000 | 1 | 0.0000 | 1 |

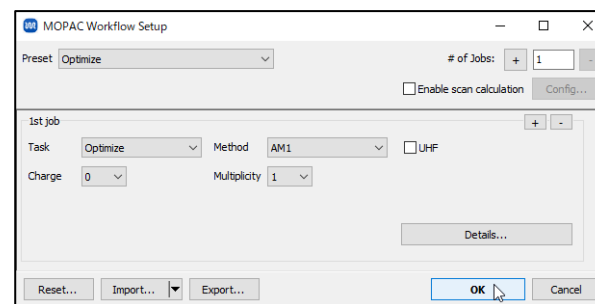
| 表示項目 | <input checked="" type="checkbox"/> 最適化フラグ | <input type="checkbox"/> 電荷 | <input type="checkbox"/> 名前 | <input type="checkbox"/> スピン密度 |
|--------|--|-----------------------------|-----------------------------|--------------------------------|
| 属性 | 番号 1 | 元素 C | | |
| 座標 | 0 | 0 | 0 | |
| 最適化フラグ | 1 | 1 | 1 | |

【プロジェクトモード】 操作の流れ

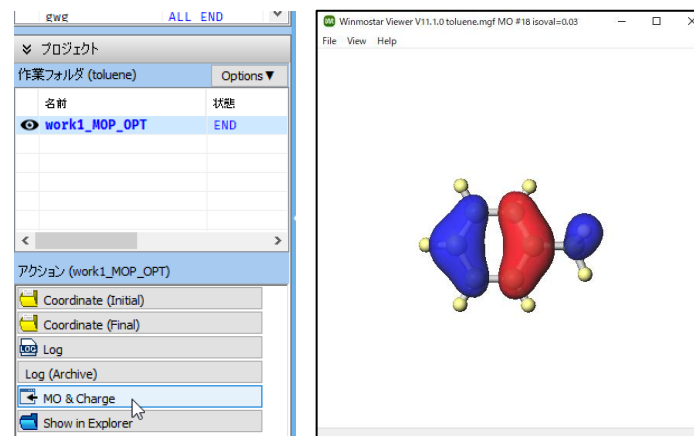
- ① 分子表示エリアに計算したい原子・分子構造を作成



- ② ワークフロー設定で計算条件を設定し、計算を実行



- ③ プロジェクト表示エリアで計算の進捗を確認し、アクションから必要な結果解析を実行



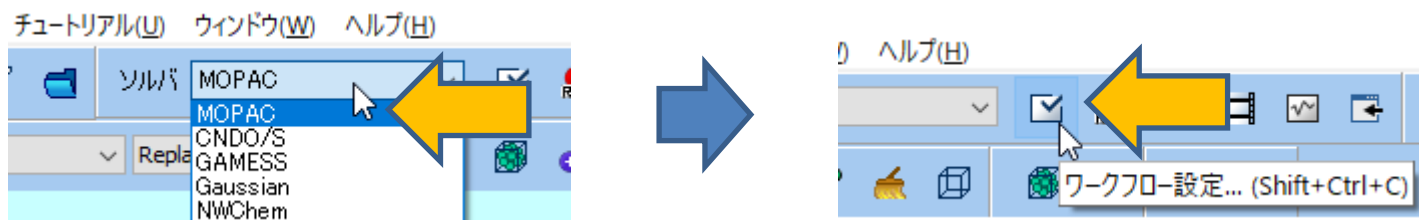
【プロジェクトモード】 分子構造の作成

- 計算する分子の構造を作成します。①構造式で入力、②SMILESで入力、③既存のファイルを読み込み、④3次元構造を手動で作成、の4つの方法で作成できます。本書では③を使います。
- **ファイル | インポート | Samplesファイル | toluene.mol**をクリックし、**破棄して読み込み**をクリックすると、分子表示エリアにトルエンの3次元構造が出現します。
 - 任意のファイルを読み込む場合はこの段階で代わりに**ファイル | ファイルをインポート**を使います。

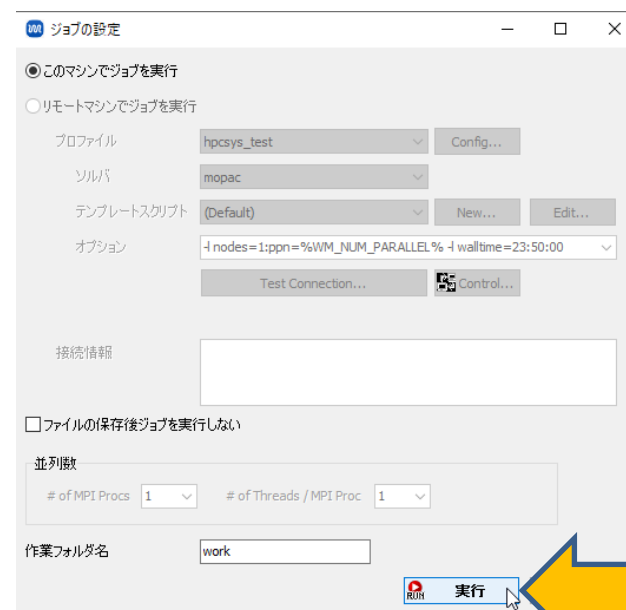
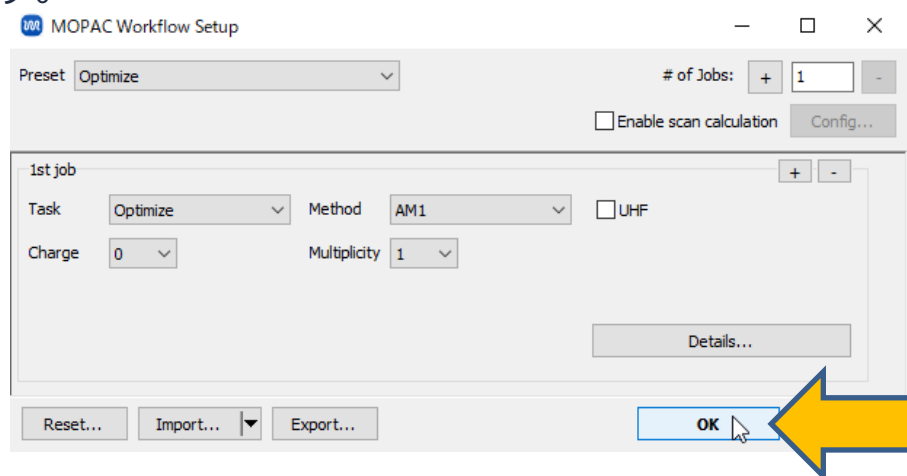
The image illustrates the workflow for loading a molecular structure file into the software. It shows the 'File' menu path: File > Import > Samples File > toluene.mol. A dialog box titled 'File Import' asks 'Do you want to overwrite the current content and load the new molecular structure?' with three buttons: 'Overwrite and load' (highlighted with a yellow arrow), 'Load', and 'Cancel'. The final result is a 3D ball-and-stick model of toluene (C₇H₈) displayed in the main window.

【プロジェクトモード】 計算の実行

- メインウィンドウ上部のソルバで「MOPAC」を選択し、**ワークフロー設定**をクリックします。（ボタン名はポインタを合わせると表示されます）



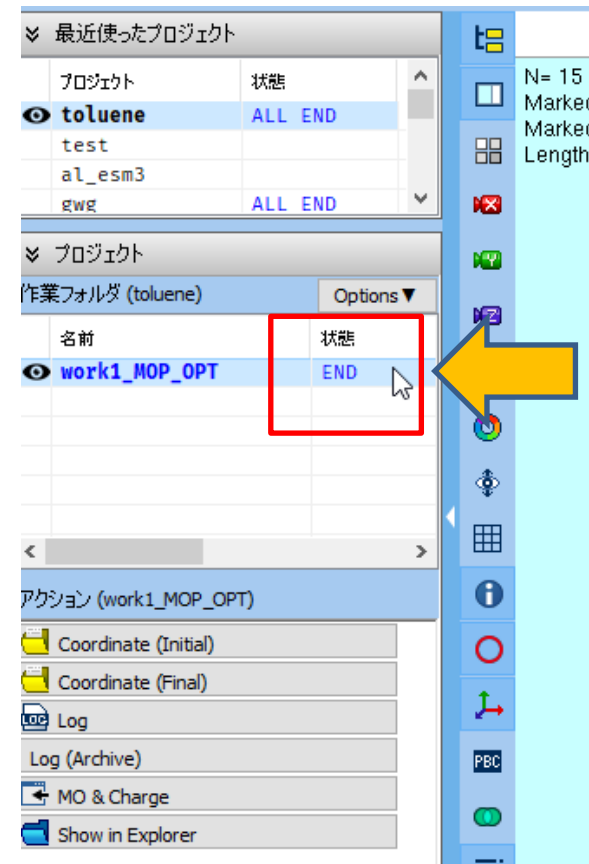
- MOPAC Workflow Setup**ウィンドウでは必要に応じて計算条件を変更します。本書ではデフォルト設定のまま**OK**をクリックします。**ジョブの設定**ウィンドウで**実行**をクリックします。



【プロジェクトモード】 計算の実行

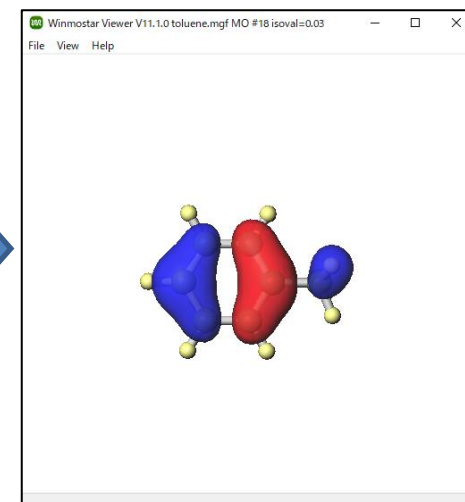
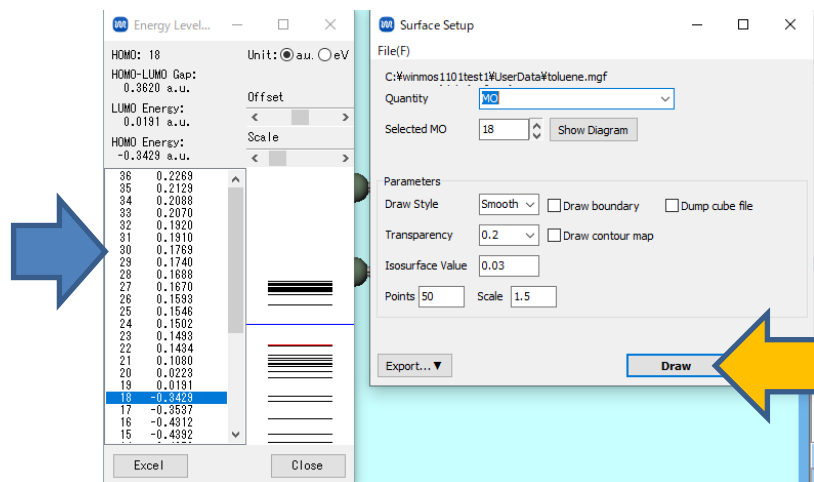
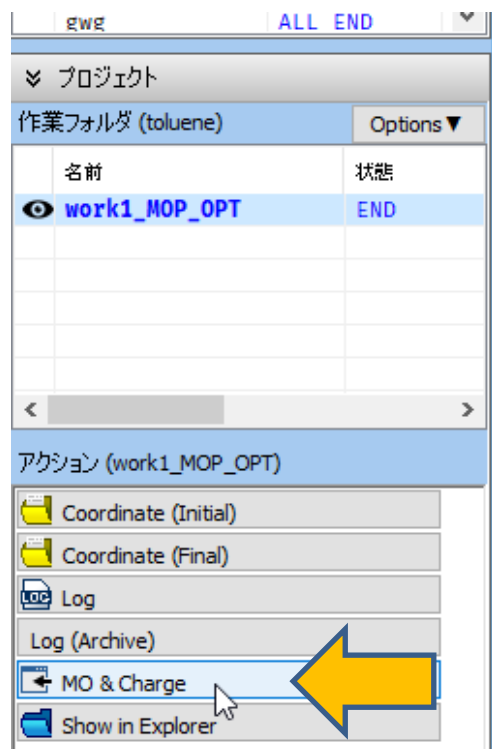
- **Winmostar Job Manager**が起動し、Winmostar Job Manager経由でジョブが実行されます。ソルバの実行中（今回の計算では1秒もかからない）、黒いウィンドウが出現します。
- **プロジェクト表示エリアの作業フォルダ**に今回のジョブの「work1_MOP_OPT」が出現し、状態が**PEND（黒）** → **RUN（緑）** → **END（青）**と変化します。

```
CYCLE: 10 TIME: .03 TIME LEFT: 3599.7 GRAD.: 1344.541 HEAT: 90.53185
CYCLE: 11 TIME: .03 TIME LEFT: 3599.6 GRAD.: 1227.507 HEAT: 110.2806
CYCLE: 12 TIME: .05 TIME LEFT: 3599.6 GRAD.: 674.531 HEAT: 63.17431
CYCLE: 13 TIME: .05 TIME LEFT: 3599.5 GRAD.: 1493.196 HEAT: 81.34975
CYCLE: 14 TIME: .05 TIME LEFT: 3599.5 GRAD.: 250.618 HEAT: 43.82854
CYCLE: 15 TIME: .05 TIME LEFT: 3599.5 GRAD.: 191.141 HEAT: 41.28660
CYCLE: 16 TIME: .03 TIME LEFT: 3599.4 GRAD.: 66.591 HEAT: 39.94230
CYCLE: 17 TIME: .03 TIME LEFT: 3599.4 GRAD.: 53.650 HEAT: 39.52613
CYCLE: 18 TIME: .05 TIME LEFT: 3599.3 GRAD.: 33.445 HEAT: 39.28663
CYCLE: 19 TIME: .05 TIME LEFT: 3599.3 GRAD.: 13.650 HEAT: 39.18944
CYCLE: 20 TIME: .03 TIME LEFT: 3599.3 GRAD.: 13.085 HEAT: 39.15706
CYCLE: 21 TIME: .03 TIME LEFT: 3599.2 GRAD.: 9.812 HEAT: 39.13082
CYCLE: 22 TIME: .05 TIME LEFT: 3599.2 GRAD.: 4.541 HEAT: 39.10855
CYCLE: 23 TIME: .03 TIME LEFT: 3599.2 GRAD.: 5.196 HEAT: 39.09493
CYCLE: 24 TIME: .05 TIME LEFT: 3599.1 GRAD.: 6.827 HEAT: 39.07691
CYCLE: 25 TIME: .05 TIME LEFT: 3599.1 GRAD.: 6.309 HEAT: 39.06044
CYCLE: 26 TIME: .03 TIME LEFT: 3599.0 GRAD.: 4.511 HEAT: 39.04067
CYCLE: 27 TIME: .03 TIME LEFT: 3599.0 GRAD.: 5.284 HEAT: 39.01929
CYCLE: 28 TIME: .05 TIME LEFT: 3599.0 GRAD.: 6.504 HEAT: 38.99742
CYCLE: 29 TIME: .03 TIME LEFT: 3598.9 GRAD.: 5.556 HEAT: 38.97976
CYCLE: 30 TIME: .03 TIME LEFT: 3598.9 GRAD.: 3.221 HEAT: 38.96655
CYCLE: 31 TIME: .03 TIME LEFT: 3598.9 GRAD.: 3.199 HEAT: 38.95711
CYCLE: 32 TIME: .05 TIME LEFT: 3598.8 GRAD.: 3.916 HEAT: 38.94901
CYCLE: 33 TIME: .03 TIME LEFT: 3598.8 GRAD.: 3.269 HEAT: 38.94138
CYCLE: 34 TIME: .03 TIME LEFT: 3598.8 GRAD.: 2.758 HEAT: 38.93337
CYCLE: 35 TIME: .03 TIME LEFT: 3598.7 GRAD.: 3.138 HEAT: 38.92474
```



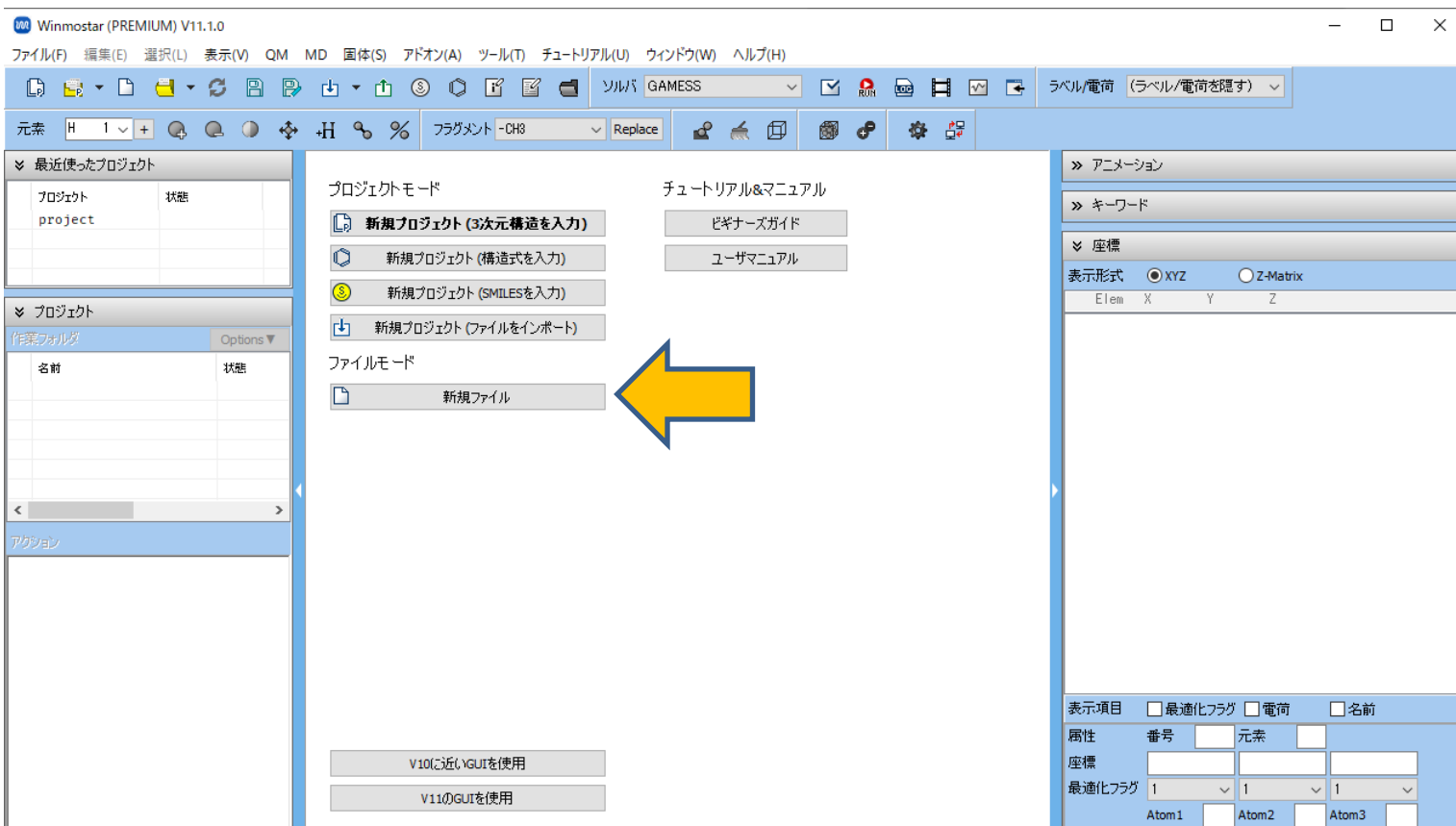
【プロジェクトモード】 結果解析

- 状態が**END**に変化したらその下の**アクション**の**MO & Charge**をクリックします。
- **Energy Level Diagram**ウィンドウと**Surface Setup**ウィンドウが開きます。**Surface Setup**ウィンドウの**Draw**をクリックすると**Winmostar Viewer**が起動しHOMOの分子軌道が出現します。



【ファイルモード】 Winmostarの起動

- winmostar.exeを起動し、初期画面が出現したら**ファイルモードの新規ファイル**をクリックしてください。



【ファイルモード】メインウィンドウの構成

- 分子表示エリアと座標表示エリアにC原子（緑）とH原子（黄）が結合した構造が出現します。

The screenshot shows the Winmostar software interface. The main window displays a ball-and-stick model of a CH₂ molecule. A callout box labeled "分子表示エリア" (Molecular Display Area) points to the model, with the text "編集集中の原子・分子構造が表示される" (Atoms and molecular structure being edited are displayed). To the right, a panel titled "座標" (Coordinates) shows a table of atomic coordinates. A callout box labeled "座標表示エリア" (Coordinate Display Area) points to this table, with the text "分子表示エリアに表示中の分子構造の座標が表示される" (Coordinates of the molecular structure displayed in the molecular display area are shown).

| Elem | X | Y | Z |
|------|--------|--------|--------|
| 1 C | 0.0000 | 0.0000 | 0.0000 |
| 2 H | 1.1000 | 0.0000 | 0.0000 |

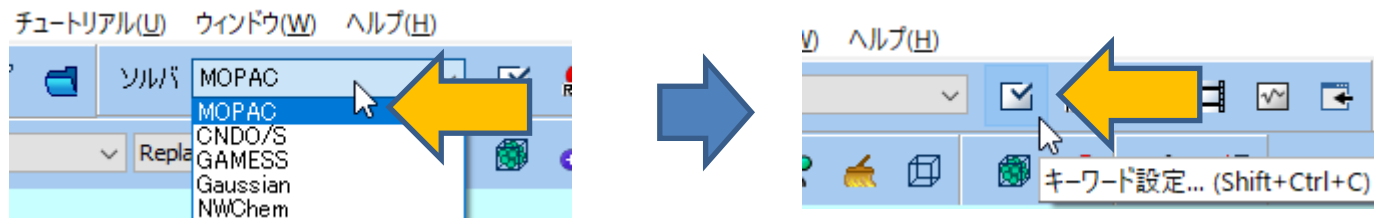
【ファイルモード】 分子構造の読み込み

- 計算する分子の構造を作成します。①構造式で入力、②SMILESで入力、③既存のファイルを読み込み、④3次元構造を手動で作成、の4つの方法で作成できます。本書では③を使います。
- ファイル | インポート | Samplesファイル | toluene.mol**をクリックし、**破棄して読み込み**をクリックすると、分子表示エリアにトルエンの3次元構造が出現します。
 - 任意のファイルを読み込む場合は代わりに**ファイル | ファイルをインポート**を使います。

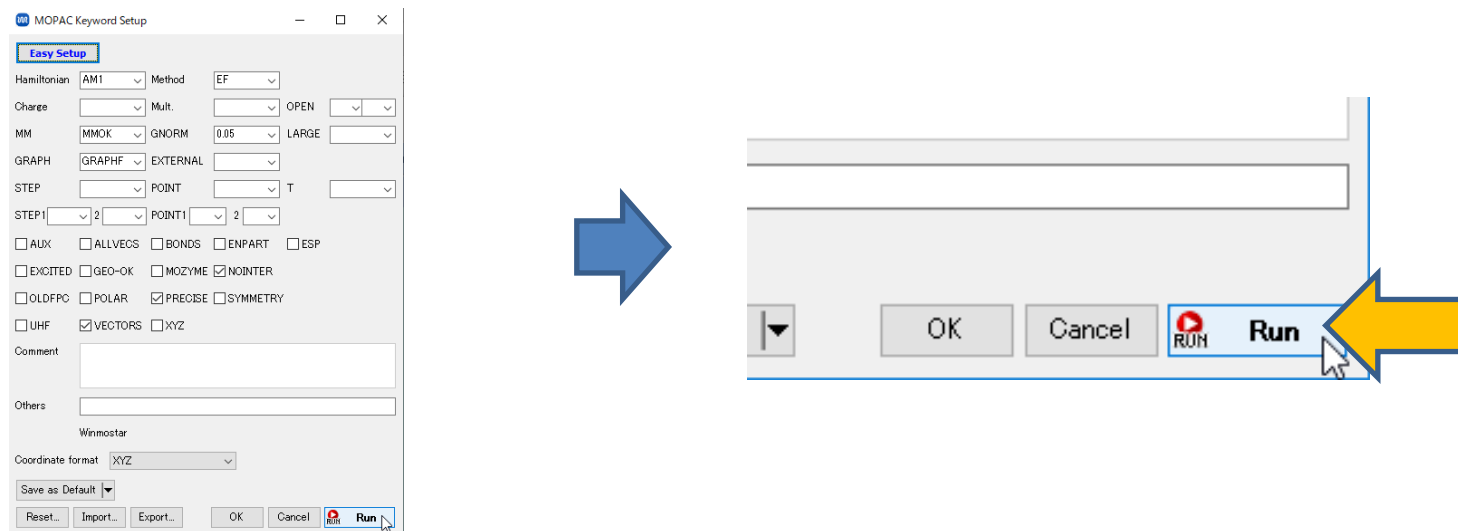
The image illustrates the workflow for loading a molecular structure from a file. It shows the 'File' menu with 'Import' selected, leading to a file list where 'toluene.mol' is chosen. A confirmation dialog box asks '現在の内容を破棄して新しい分子構造を読み込みますか?' (Do you want to discard the current content and load the new molecular structure?). The '破棄して読み込み' (Discard and load) button is highlighted. The final step shows the 3D ball-and-stick model of toluene in the main display area.

【ファイルモード】 計算の実行

- メインウィンドウ上部のソルバで「MOPAC」を選択し、**キーワード設定**をクリックします。
(ボタン名はポインタを合わせると表示されます)

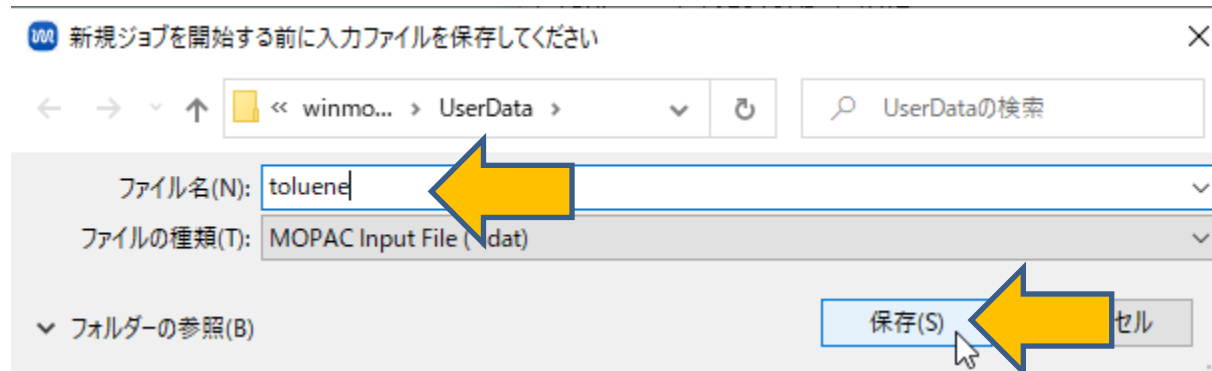


- MOPAC Keyword Setup**ウィンドウでは計算条件に応じてキーワードを変更します。本書ではデフォルト設定のままウィンドウ右下の**Run**をクリックします。



【ファイルモード】 計算の実行

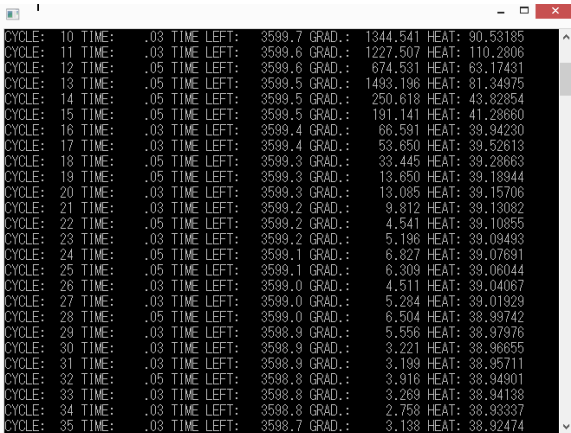
- 新規ジョブを開始する前に入力ファイルを保存してくださいというダイアログが出現します。ファイル名に「toluene」と入力し保存をクリックすると、winmos11¥UserDataの下に toluene.dat というファイルが作成され、Winmostarがtoluene.datを入力ファイルとしてMOPACを起動します。



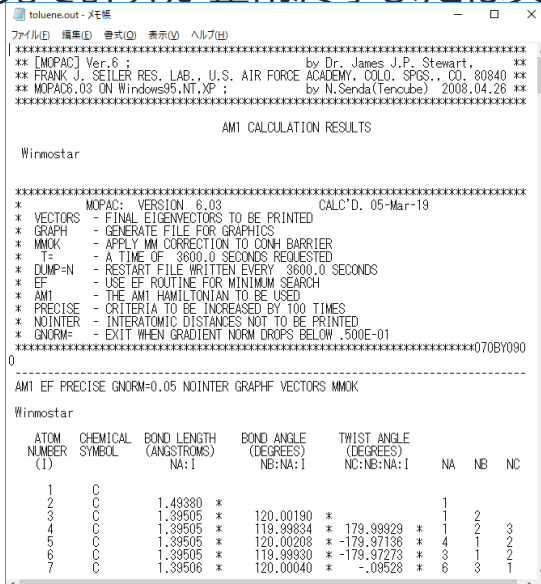

注：MOPAC, CNDO/S以外のソルバの場合は、**Winmostar Job Manager**が起動し、Winmostar Job Manager経由でジョブが実行されます。

【ファイルモード】 計算の実行

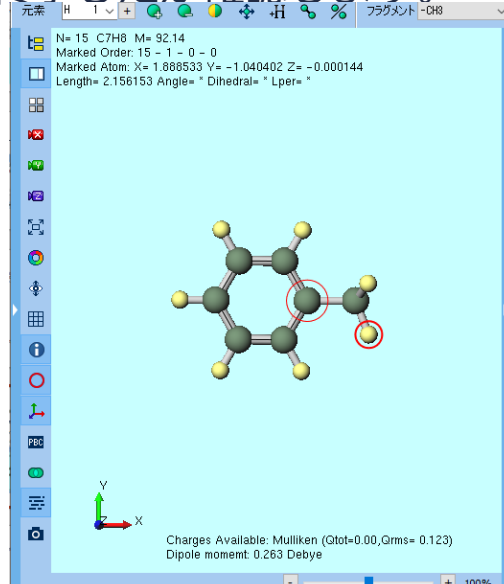
- ソルバの実行中（今回の計算では1秒もかからない）、黒いウィンドウが出現します。
- 計算が完了したら自動で以下の様に動作します。（MOPAC、CNDO/S限定）
 - ログが書かれた出力ファイル（toluene.out）がテキストファイルで開かれます。
 - 最終構造が書かれてた出力ファイル（toluene.arc）がメインウィンドウで開かれます。
- 計算終了後は毎回ログや最終構造を見て計算が正常終了または異常終了したか確認します。



CYCLE: 10 TIME: .03 TIME LEFT: 3599.7 GRAD.: 1344.541 HEAT: 90.53186
CYCLE: 11 TIME: .03 TIME LEFT: 3599.6 GRAD.: 1227.507 HEAT: 110.2806
CYCLE: 12 TIME: .05 TIME LEFT: 3599.6 GRAD.: 674.531 HEAT: 63.17431
CYCLE: 13 TIME: .05 TIME LEFT: 3599.5 GRAD.: 1493.196 HEAT: 81.34975
CYCLE: 14 TIME: .05 TIME LEFT: 3599.5 GRAD.: 250.618 HEAT: 43.82854
CYCLE: 15 TIME: .05 TIME LEFT: 3599.5 GRAD.: 191.141 HEAT: 41.28680
CYCLE: 16 TIME: .03 TIME LEFT: 3599.4 GRAD.: 66.591 HEAT: 39.94230
CYCLE: 17 TIME: .03 TIME LEFT: 3599.4 GRAD.: 53.850 HEAT: 39.52613
CYCLE: 18 TIME: .05 TIME LEFT: 3599.3 GRAD.: 39.445 HEAT: 39.28663
CYCLE: 19 TIME: .05 TIME LEFT: 3599.3 GRAD.: 13.850 HEAT: 39.18944
CYCLE: 20 TIME: .03 TIME LEFT: 3599.3 GRAD.: 13.085 HEAT: 39.15706
CYCLE: 21 TIME: .03 TIME LEFT: 3599.2 GRAD.: 9.312 HEAT: 39.13082
CYCLE: 22 TIME: .05 TIME LEFT: 3599.2 GRAD.: 4.541 HEAT: 39.10855
CYCLE: 23 TIME: .03 TIME LEFT: 3599.2 GRAD.: 5.196 HEAT: 39.09493
CYCLE: 24 TIME: .05 TIME LEFT: 3599.1 GRAD.: 6.827 HEAT: 39.07691
CYCLE: 25 TIME: .05 TIME LEFT: 3599.1 GRAD.: 6.309 HEAT: 39.06044
CYCLE: 26 TIME: .03 TIME LEFT: 3599.0 GRAD.: 4.511 HEAT: 39.04067
CYCLE: 27 TIME: .03 TIME LEFT: 3599.0 GRAD.: 5.284 HEAT: 39.01929
CYCLE: 28 TIME: .05 TIME LEFT: 3599.0 GRAD.: 6.504 HEAT: 38.99742
CYCLE: 29 TIME: .03 TIME LEFT: 3598.9 GRAD.: 5.556 HEAT: 38.97976
CYCLE: 30 TIME: .03 TIME LEFT: 3598.9 GRAD.: 3.221 HEAT: 38.96655
CYCLE: 31 TIME: .03 TIME LEFT: 3598.9 GRAD.: 3.199 HEAT: 38.95711
CYCLE: 32 TIME: .05 TIME LEFT: 3598.8 GRAD.: 3.916 HEAT: 38.94901
CYCLE: 33 TIME: .03 TIME LEFT: 3598.8 GRAD.: 3.269 HEAT: 38.94138
CYCLE: 34 TIME: .03 TIME LEFT: 3598.8 GRAD.: 2.758 HEAT: 38.93337
CYCLE: 35 TIME: .03 TIME LEFT: 3598.7 GRAD.: 3.138 HEAT: 38.92474



```
*****  
** [MOPAC] Ver.6 ; by Dr. James J.P. Stewart, **  
** FRANK J. SEILER RES. LAB., U.S. AIR FORCE ACADEMY, COLO. SPOCS., CO. 80840 **  
** MOPAC6.03 ON Windows95,NT,XP ; by N.Senda(Tencube) 2008.04.26 **  
*****  
  
AMI CALCULATION RESULTS  
  
Winmostar  
  
*****  
MOPAC: VERSION 6.03 CALC'D. 05-Mar-19  
* VECTORS - FINAL EIGENVECTORS TO BE PRINTED  
* GRAPH - GENERATE FILE FOR GRAPHICS  
* MMCK - APPLY MM CORRECTION TO CONJ BARRIER  
* T= - A TIME OF 3600.0 SECONDS REQUESTED  
* DUMP=N - RESTART FILE WRITTEN EVERY 3600.0 SECONDS  
* EF - USE EF ROUTINE FOR MINIMUM SEARCH  
* AMI - THE AMI HAMILTONIAN TO BE USED  
* PRECISE - CRITERIA TO BE INCREASED BY 100 TIMES  
* NOUTER - INTERATOMIC DISTANCES NOT TO BE PRINTED  
* GNORM= - EXIT WHEN GRADIENT NORM DROPS BELOW .500E-01  
*****070BY090  
0  
AMI EF PRECISE GNORM=0.05 NOUTER GRAPHF VECTORS MMCK  
  
Winmostar  
  
ATOM CHEMICAL BOND LENGTH BOND ANGLE TWIST ANGLE  
NUMBER SYMBOL (ANGSTROMS) (DEGREES) (DEGREES)  
(I) NA:1 NB:NA:1 NC:NB:NA:1 NA NB NC  
  
1 C 1.49380 *  
2 C 1.39505 * 120.00190 *  
3 C 1.39505 * 119.99834 * 179.99929 * 1 2 3  
4 C 1.39505 * 120.00208 * -179.97136 * 4 1 2  
5 C 1.39505 * 119.99930 * -179.97273 * 3 1 2  
6 C 1.39506 * 120.00040 * -.09528 * 6 3 1  
7 C
```

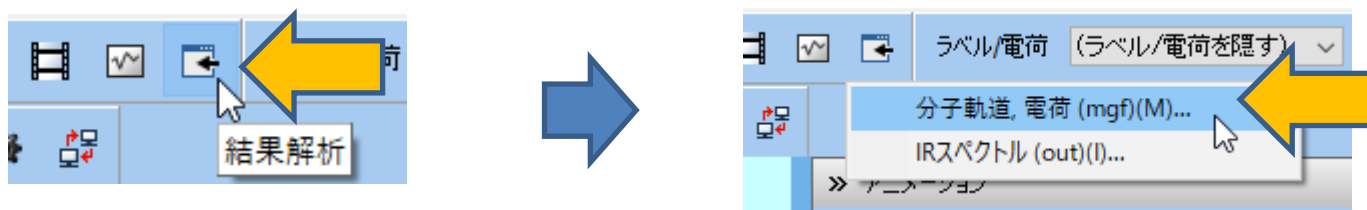


N= 15 C7H8 M= 92.14
Marked Order: 15 - 1 - 0 - 0
Marked Atom: X= 1.888533 Y= -1.040402 Z= -0.000144
Length= 2.156153 Angle= Dihedral = Lper= *

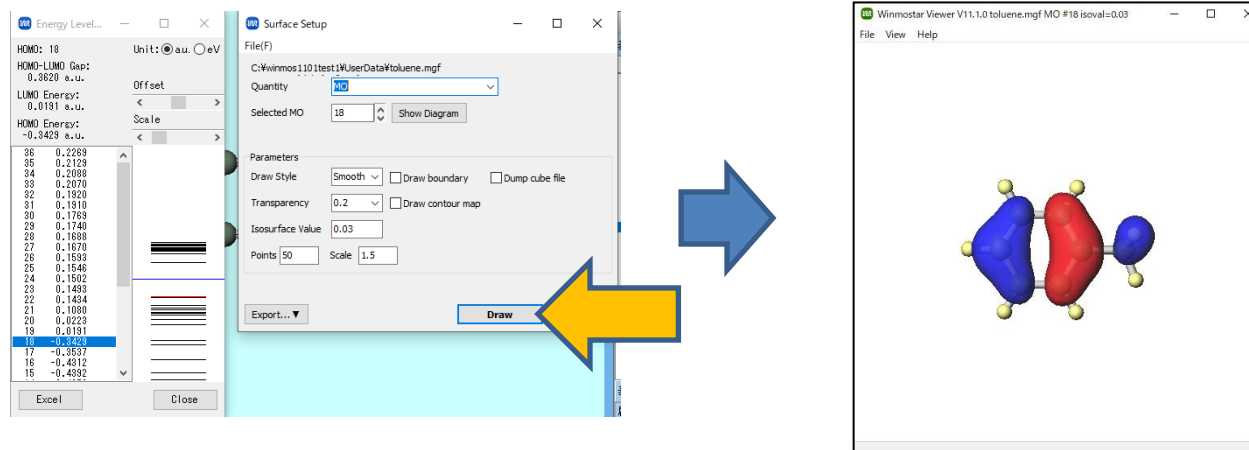
Charges Available: Mulliken (Qtot=0.00,Grms= 0.123)
Dipole moment: 0.263 Debye

【ファイルモード】 結果解析

- メインウィンドウ上部の結果解析をクリックし、分子軌道、電荷をクリックすると開くダイアログが開きます。デフォルトではメインウィンドウで開かれているファイルに紐付けられた出力ファイル (toluene.mgf) が選択されるので、そのまま開くをクリックします。

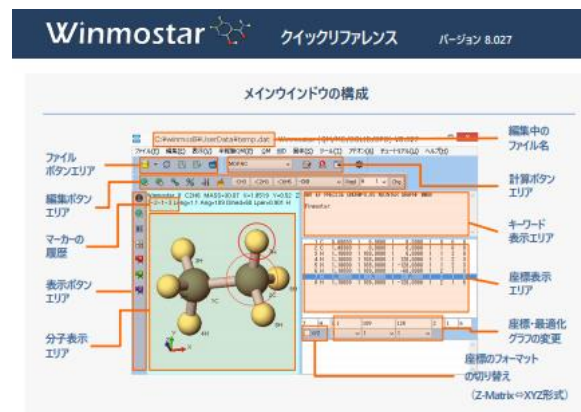


- Energy Level DiagramウィンドウとSurface Setupウィンドウが開きます。Surface SetupウィンドウのDrawをクリックするとWinmostar Viewerが起動しHOMOの分子軌道が出現します。



応用的な計算を実施するために

- チュートリアル <https://winmostar.com/jp/tutorials/> の中からまず使用したいソルバの基礎編をトレースし、その後関心のある系のチュートリアルをトレースしてください。



- 詳細はマニュアル <https://winmostar.com/jp/manuals/> 、よく使う操作はクイックリファレンスを参照してください。
- 不明な点や思い通りに動かない場合はよくある質問 <https://winmostar.com/jp/faq> をご確認ください。

以上