winmostar

Winmostar V11
ビギナーズガイド

V11.3.2

2025年7月7日　　株式会社クロスアビリティ

Copyright 2008-2025 X-Ability Co., Ltd.

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。

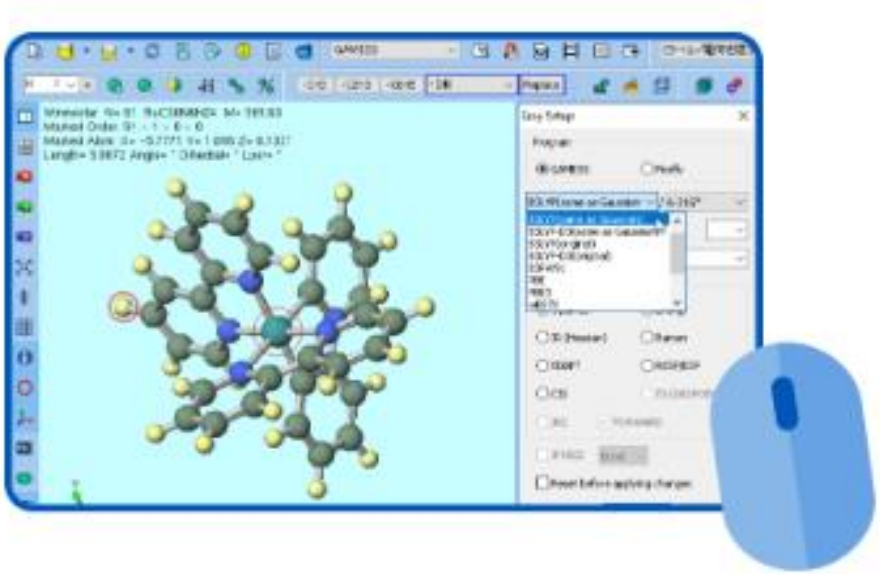
- 不明な点がある場合や本書の通りに動かない場合はまず、随時更新されている
  よくある質問　https://winmostar.com/jp/faq/　をご確認ください。

- 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。

Copyright 2008-2025 X-Ability Co., Ltd.

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）

 Copyright 2008-2025 X-Ability Co., Ltd.

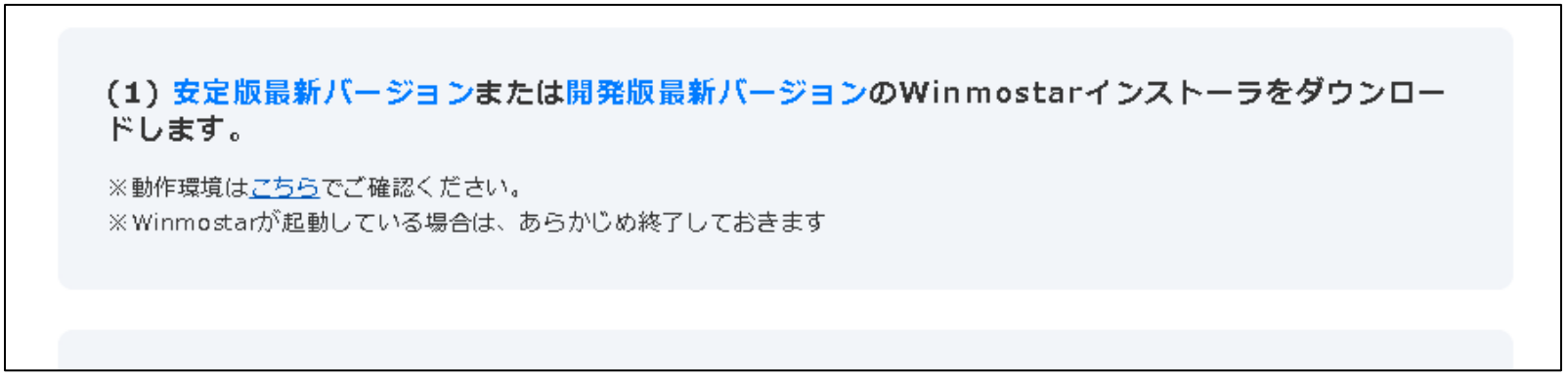
Winmostarのセットアップ方法

- 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。

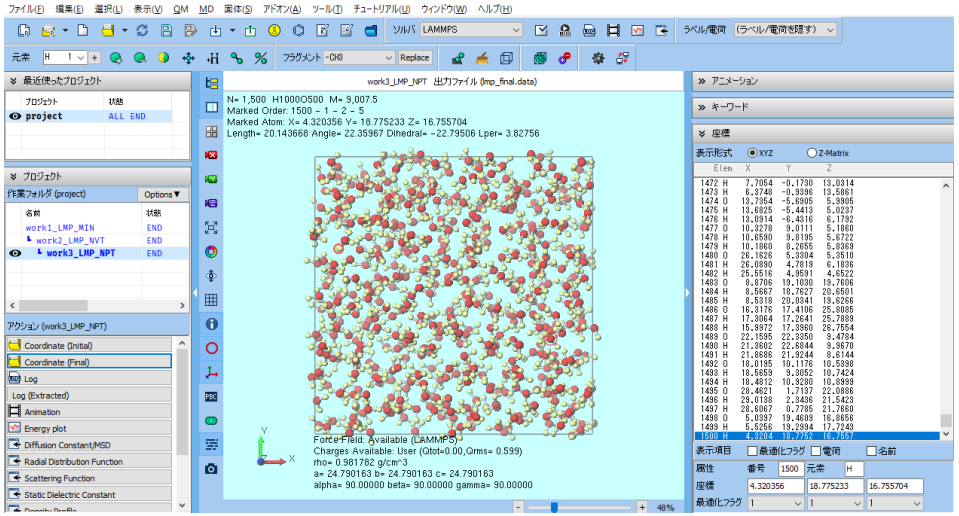


Copyright 2008-2025 X-Ability Co., Ltd.

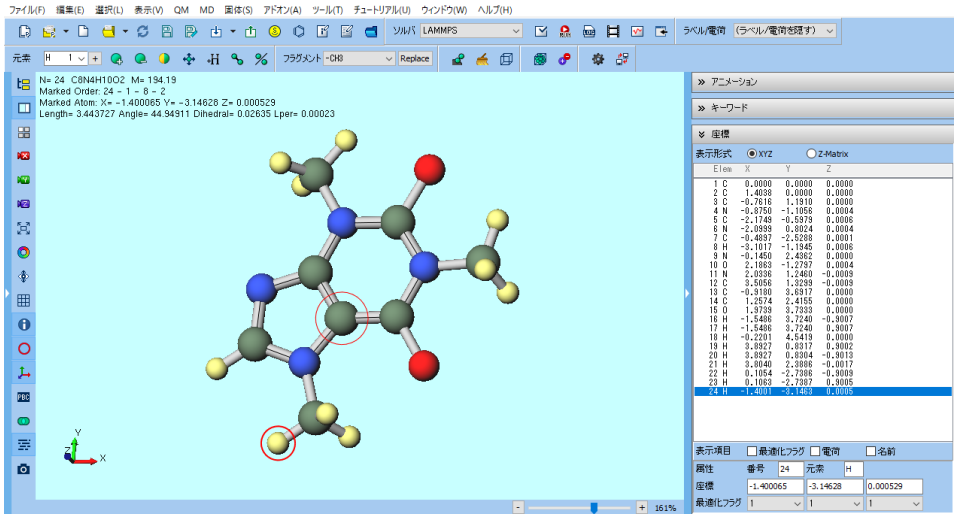
Winmostarの動作モード

- **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（2025年7月）で未対応のソルバ（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。



Copyright 2008-2025 X-Ability Co., Ltd.

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

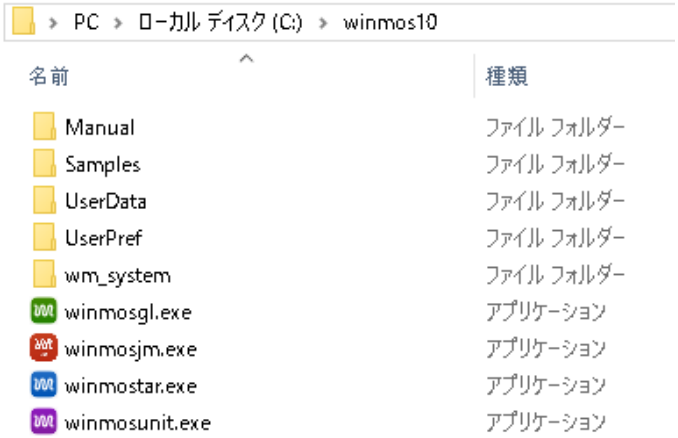
ファイルモード

- 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

Copyright 2008-2025 X-Ability Co., Ltd.

Winmostarのファイル構成

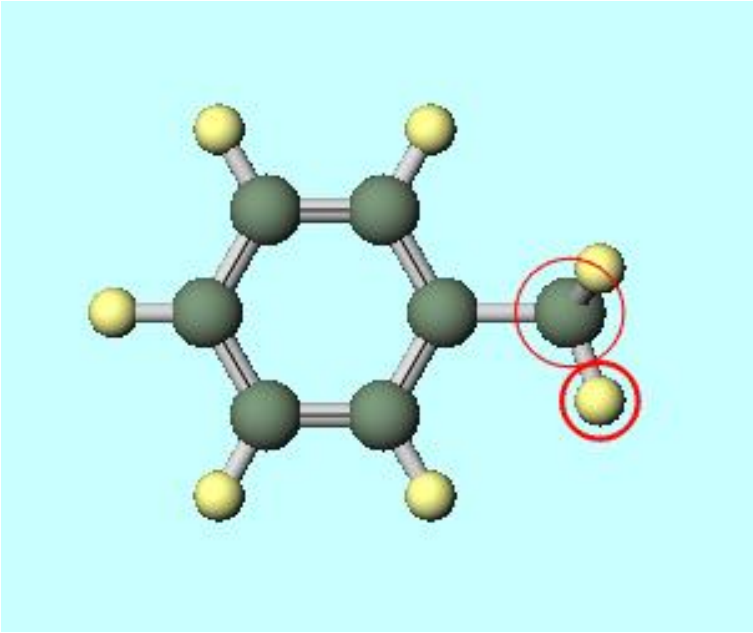
- Winmostarをインストールしたフォルダの内容は以下の通りです。（一部のみ記載）
  - winmostar.exe：Winmostar本体のアプリ　（Winmostar）
  - winmosjm.exe ：ローカルジョブを管理するアプリ　（Winmostar Job Manager）
  - winmosgl.exe ：分子軌道などを表示するアプリ　（Winmostar Viewer）
  - winmosunit.exe：数値の単位を変換　（Winmostar Unit Converter）
  - UserPref¥　：Winmostarのユーザ設定を収めたフォルダ
  - UserData¥　：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

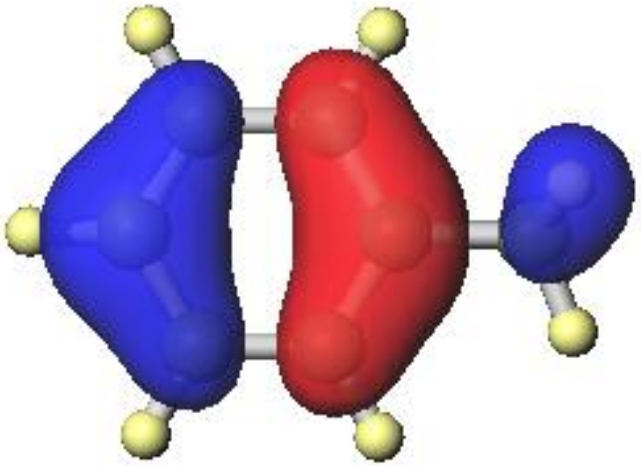


Copyright 2008-2025 X-Ability Co., Ltd.

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。



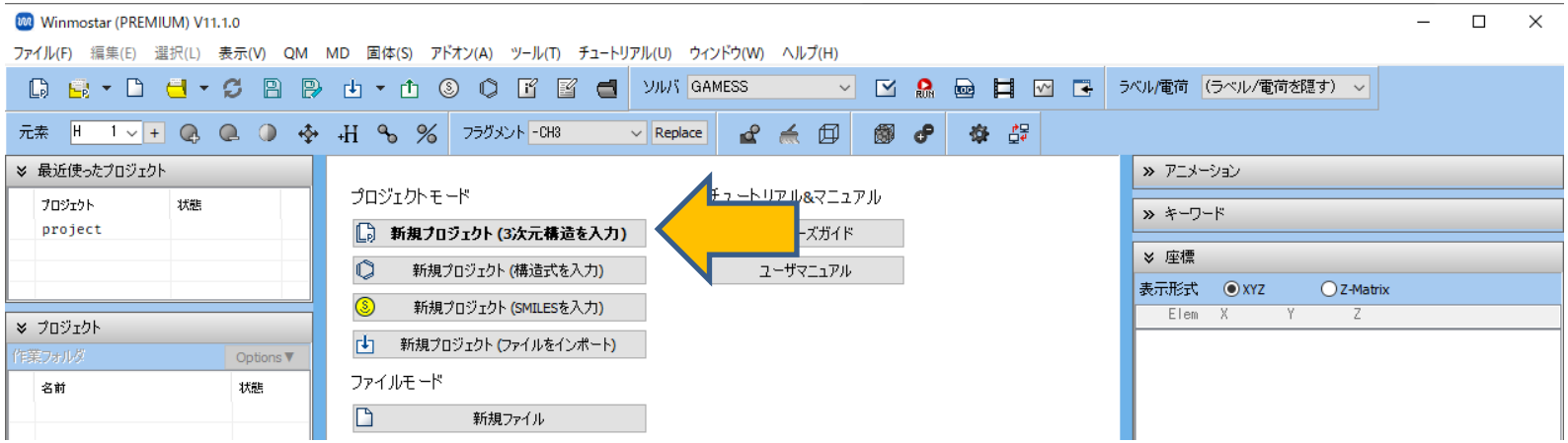


Copyright 2008-2025 X-Ability Co., Ltd.

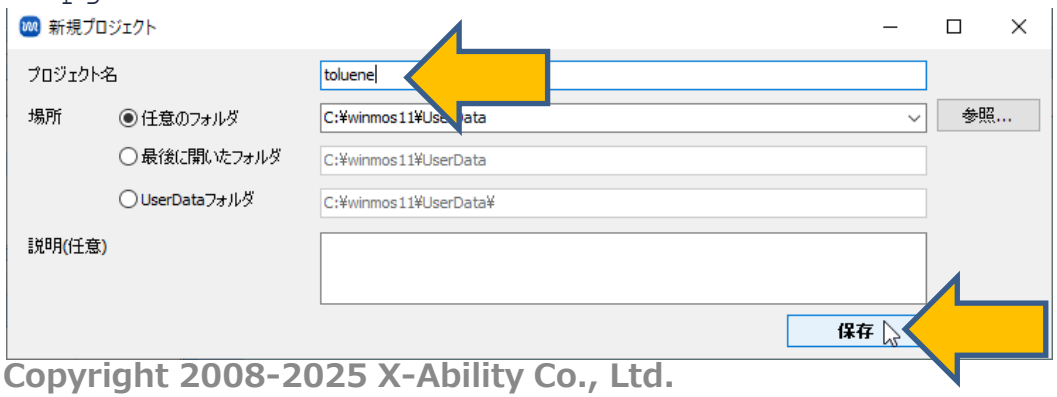
【プロジェクトモード】Winmostarの起動

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。



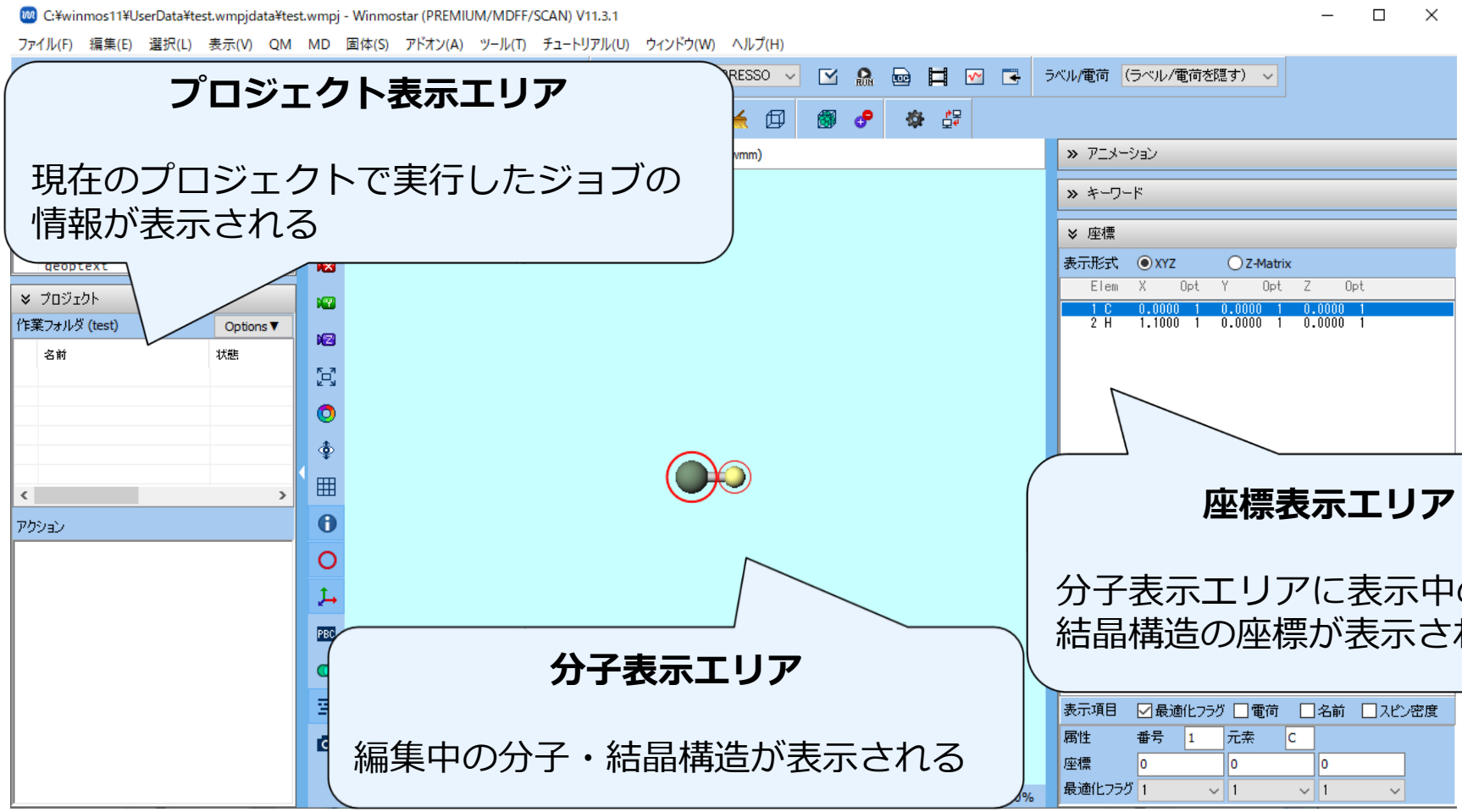
- プロジェクト名に「toluene」（半角英数字）と入力して**保存**をクリックしてください。
  - toluene.wmpjdataフォルダが作成され、このプロジェクトに関するファイルが収められます。その下にtoluene.wmpjが作成され、このプロジェクトの主要な情報が出力されます。（詳細はこちら）



Copyright 2008-2025 X-Ability Co., Ltd.

【プロジェクトモード】メインウィンドウの構成

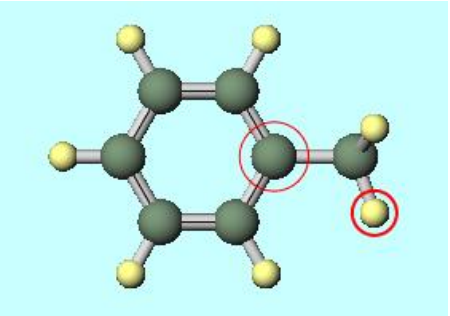
- **分子表示エリア**と**座標表示エリア**に**C原子（緑）**と**H原子（黄）**が結合した構造が出現します。



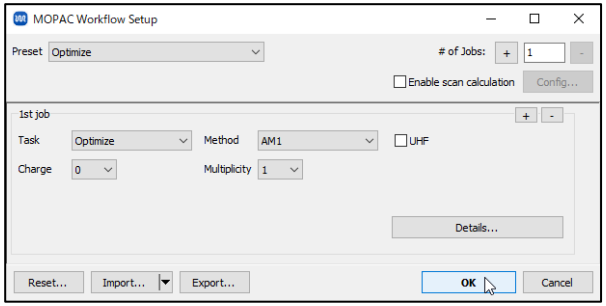
Copyright 2008-2025 X-Ability Co., Ltd.

【プロジェクトモード】操作の流れ

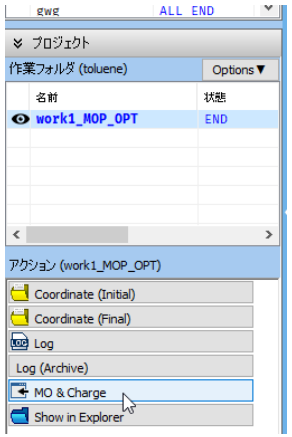
① **分子表示エリア**に計算したい分子・結晶構造を作成

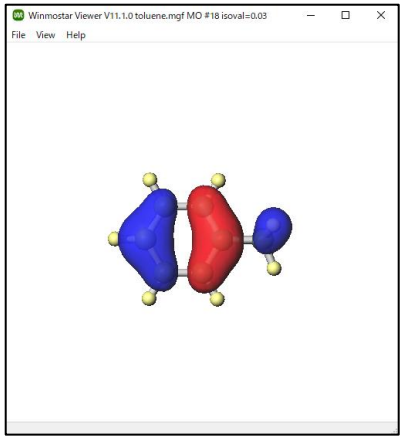


② **ワークフロー設定**で計算条件を設定し、計算を実行



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

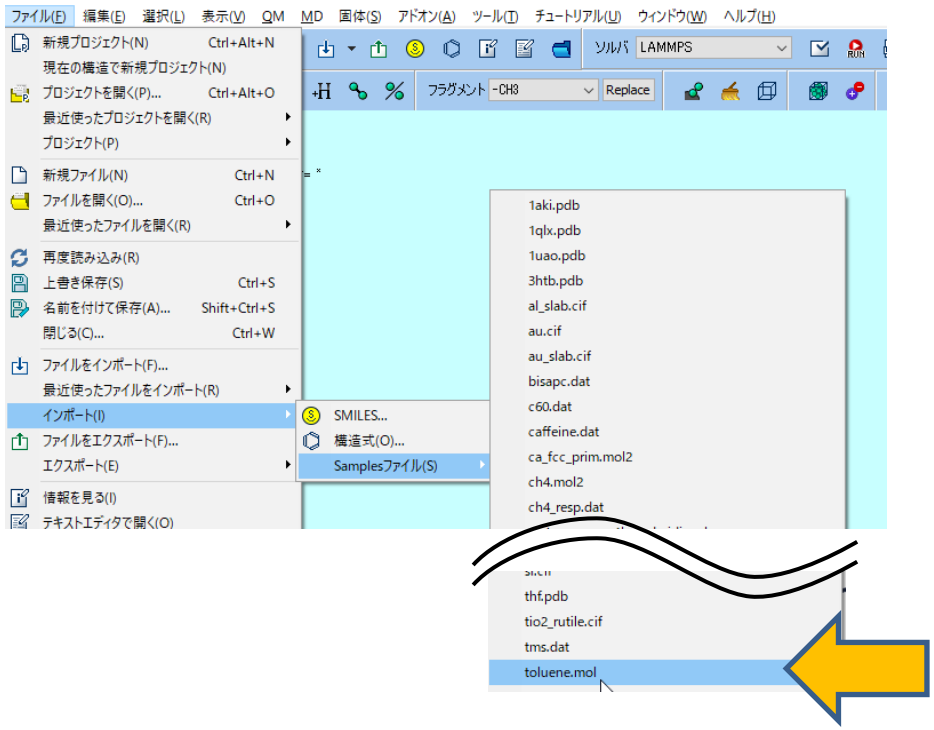


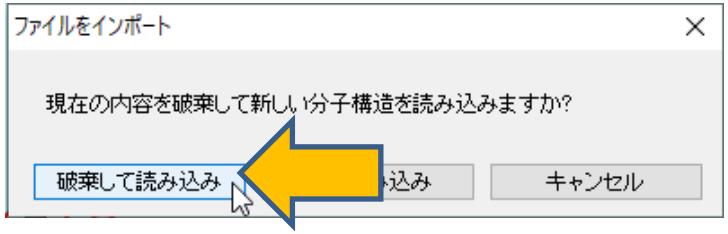


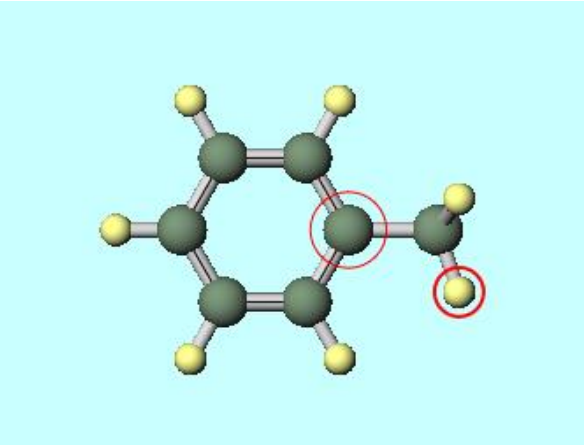
Copyright 2008-2025 X-Ability Co., Ltd.

【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。



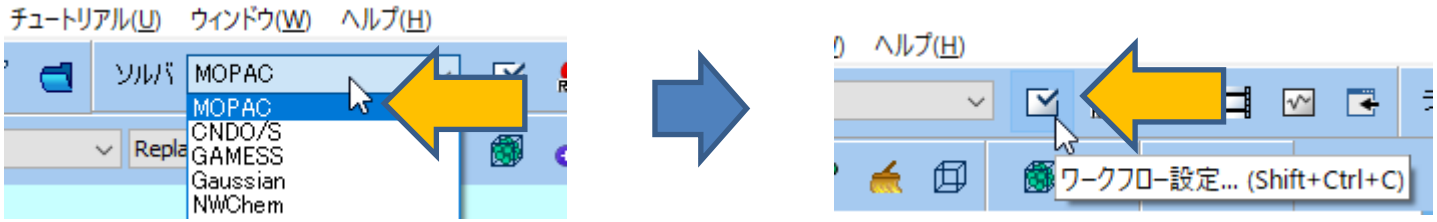




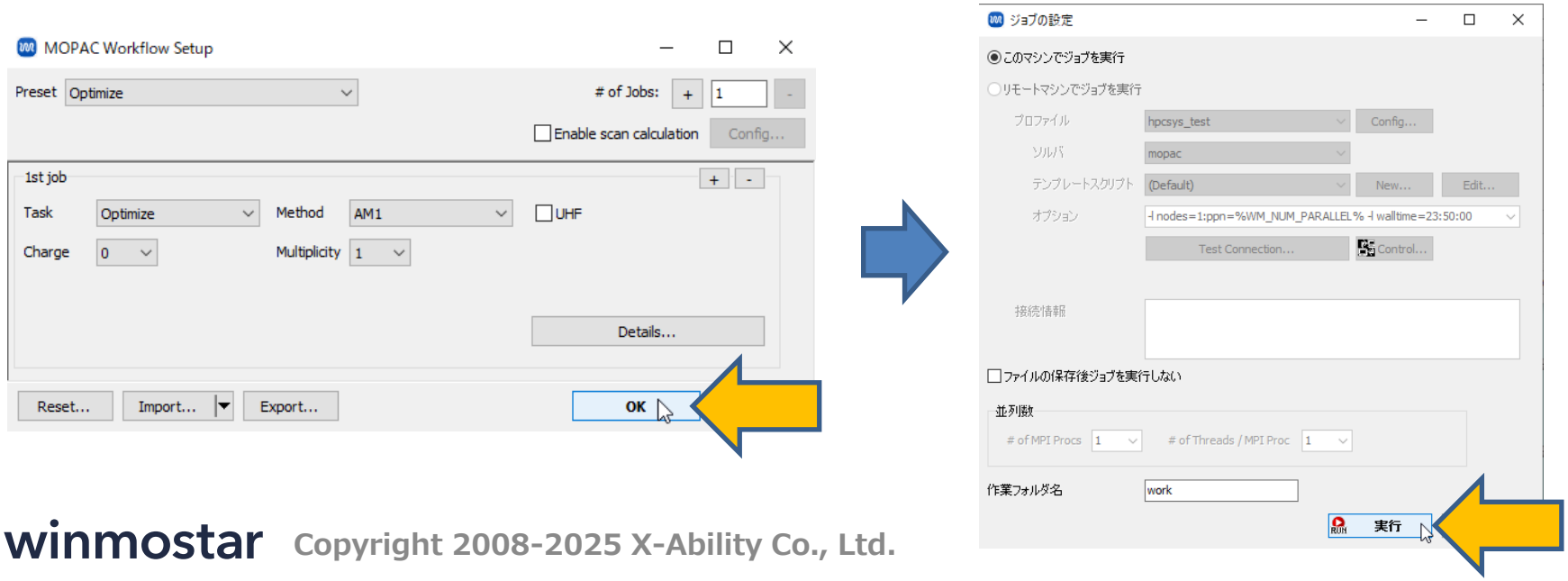
Copyright 2008-2025 X-Ability Co., Ltd.

【プロジェクトモード】計算の実行

- メインウインドウ上部の**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）



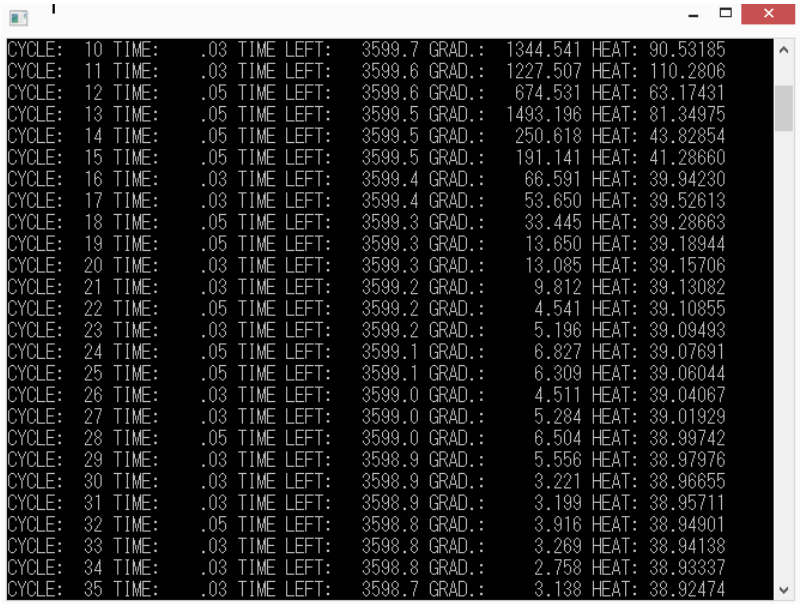
- **MOPAC Workflow Setup**ウインドウでは必要に応じて計算条件を変更します。本書ではデフォルト設定のまま**OK**をクリックします。**ジョブの設定**ウィンドウで**実行**をクリックします。

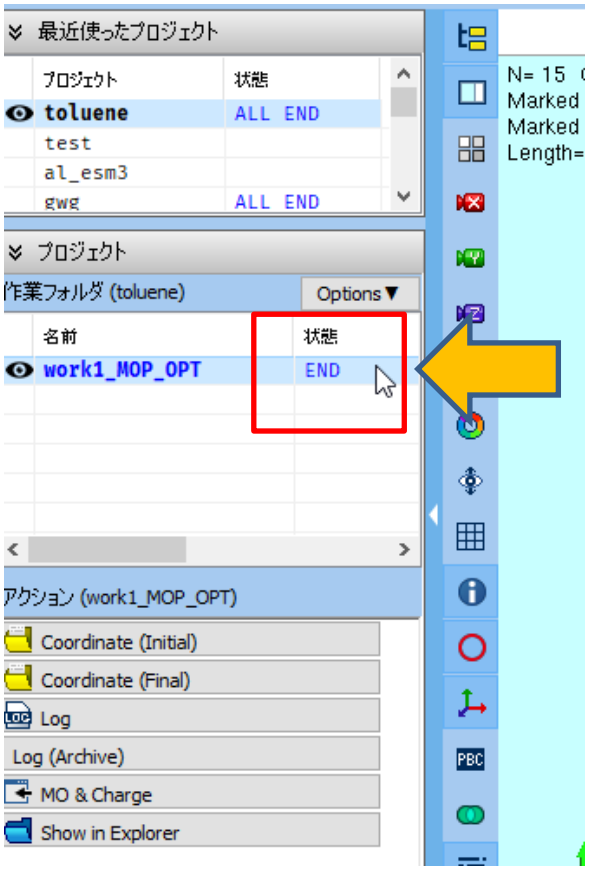


Copyright 2008-2025 X-Ability Co., Ltd.

【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）、黒いウイ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。

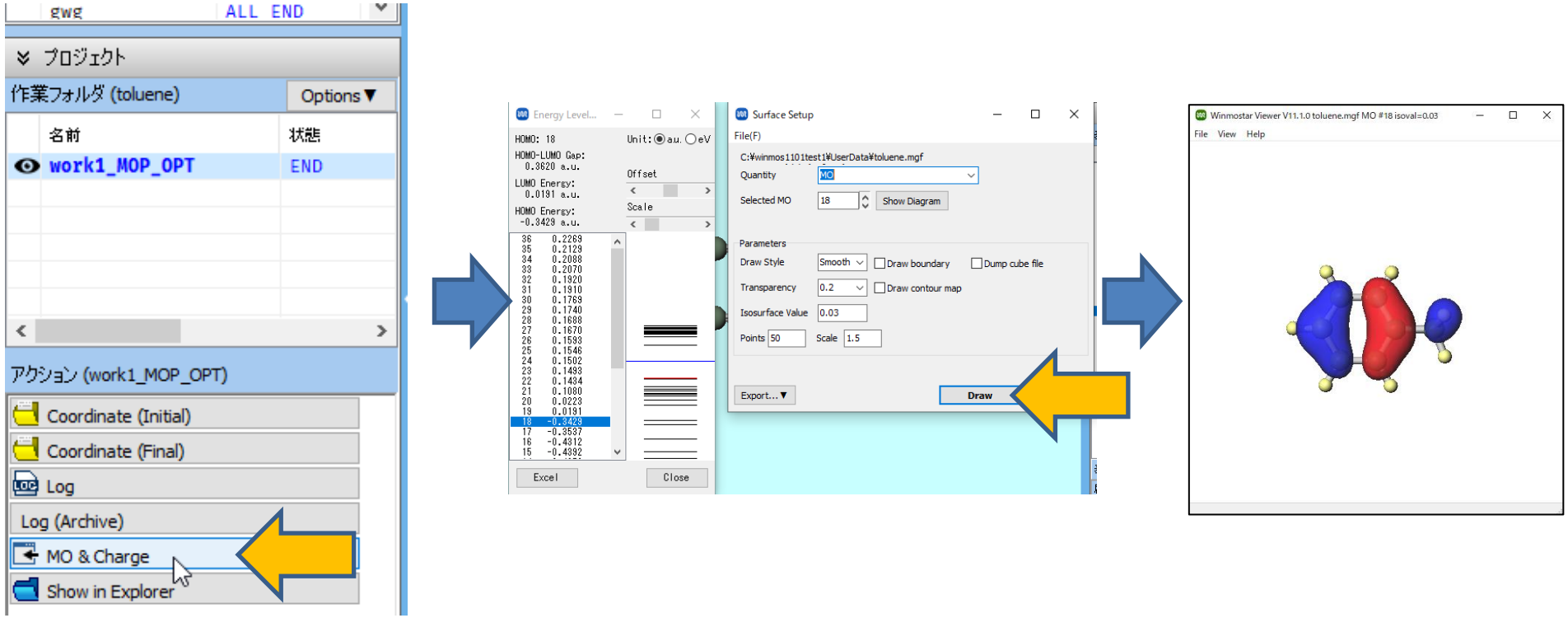




Copyright 2008-2025 X-Ability Co., Ltd.

【プロジェクトモード】結果解析

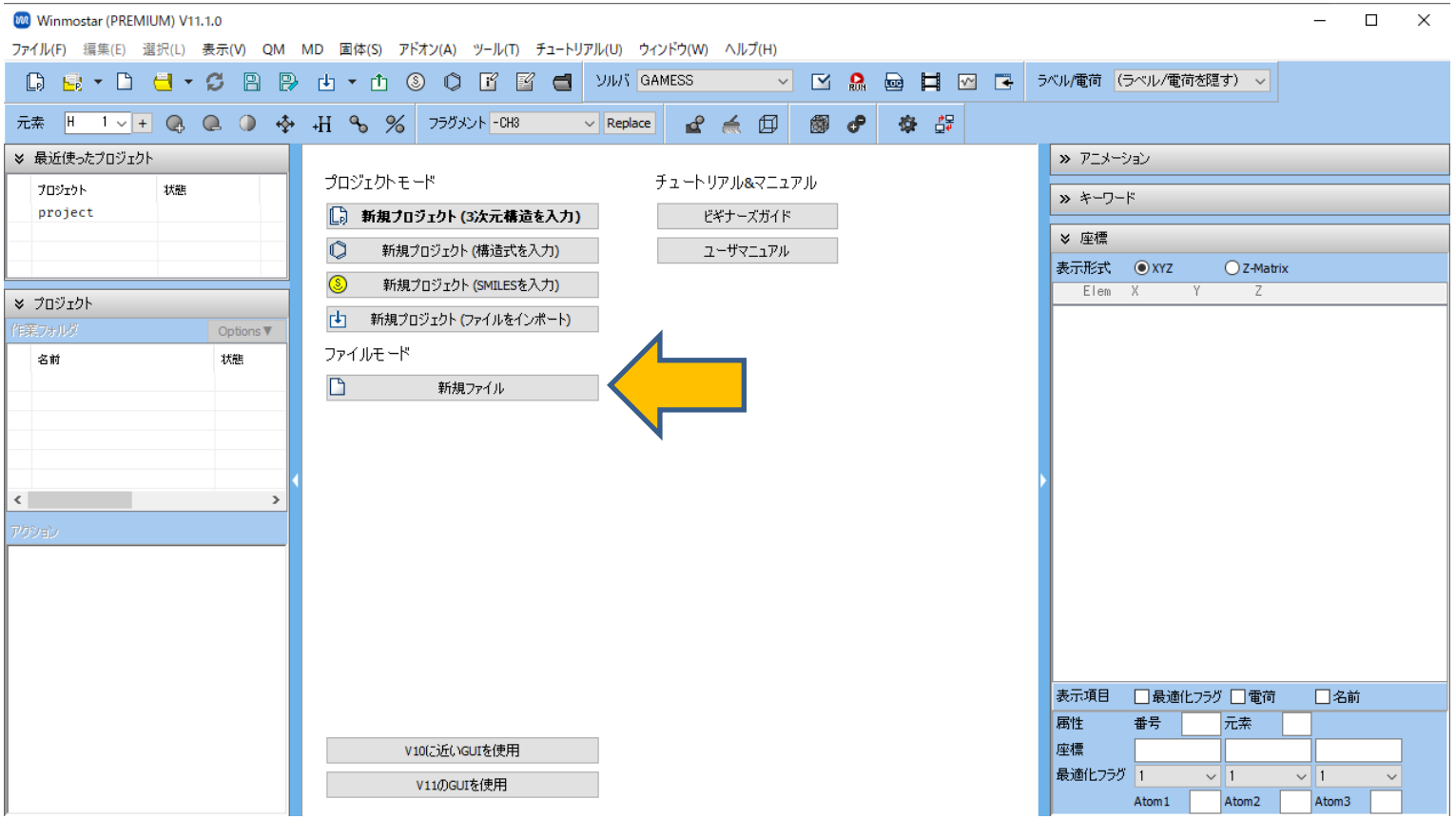
- **状態**が**END**に変化したらその下の**アクション**の**MO & Charge**をクリックします。
- **Energy Level Diagram**ウインドウと**Surface Setup**ウインドウが開きます。**Surface Setup**ウインドウの**Draw**をクリックすると**Winmostar Viewer**が起動しHOMOの分子軌道が出現します。



Copyright 2008-2025 X-Ability Co., Ltd.

【ファイルモード】Winmostarの起動

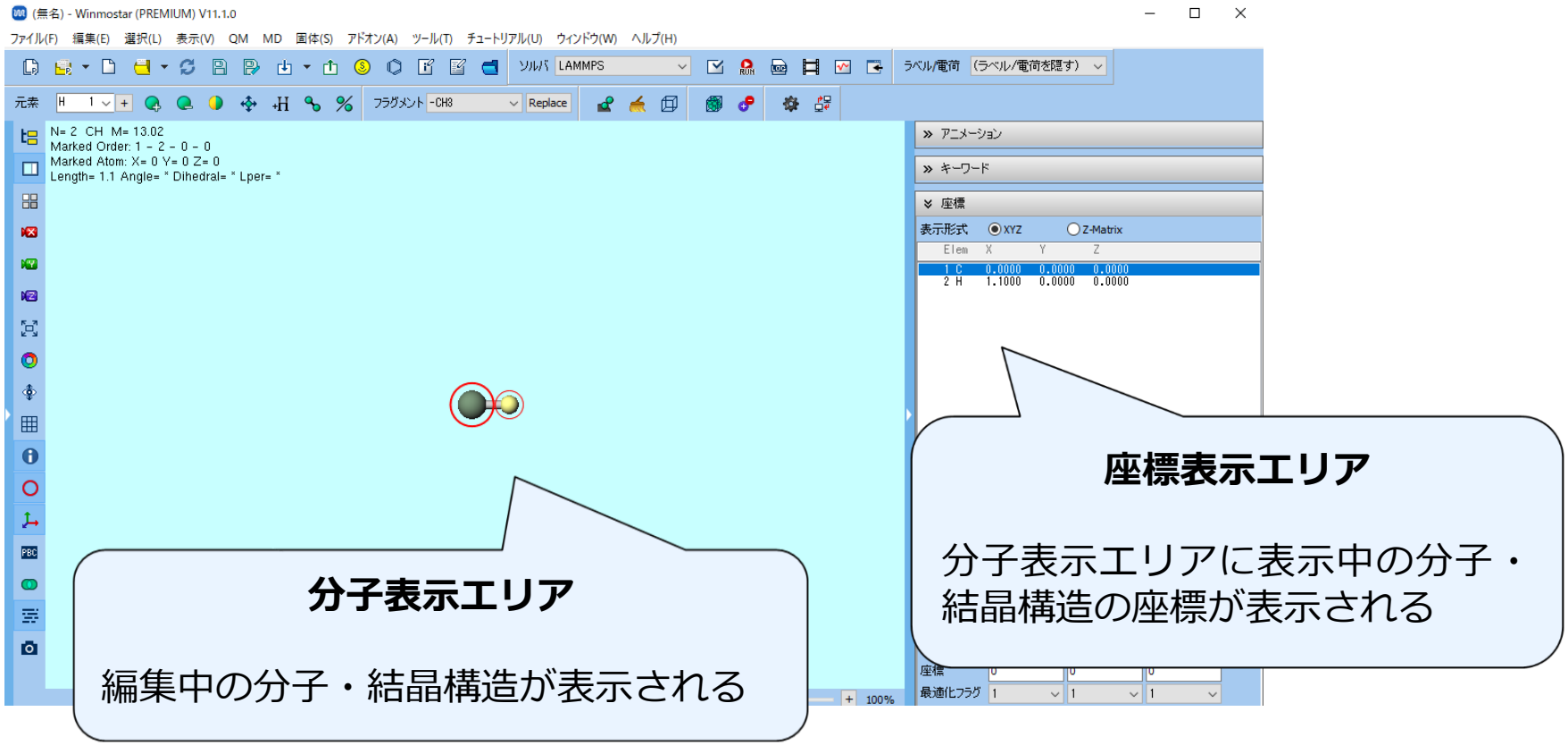
- `winmostar.exe`を起動し、初期画面が出現したら**ファイルモード**の**新規ファイル**をクリックしてください。



Copyright 2008-2025 X-Ability Co., Ltd.

【ファイルモード】メインウィンドウの構成

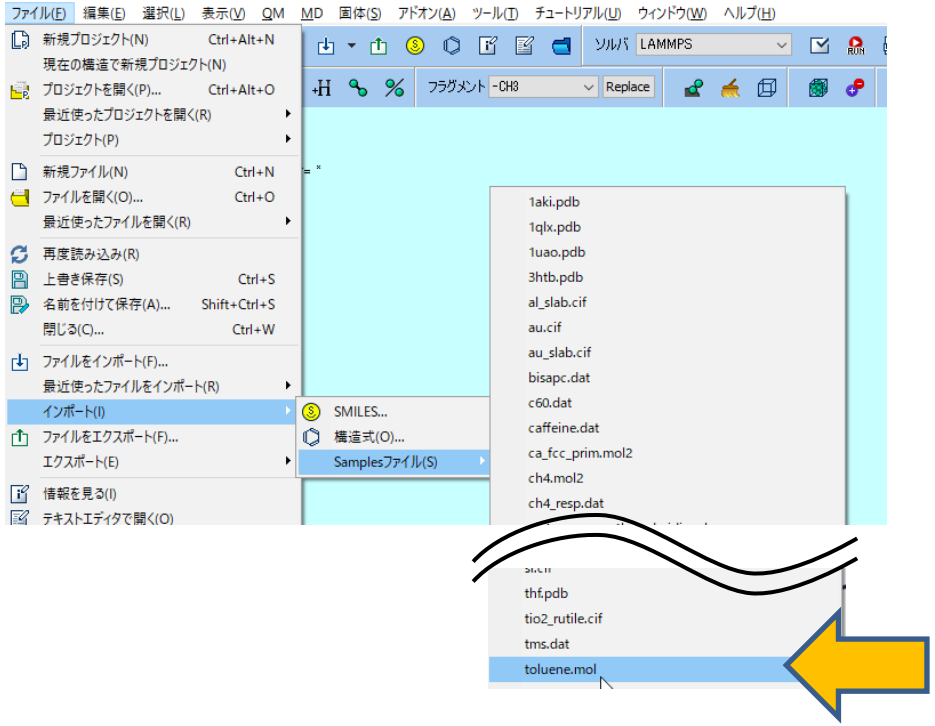
- **分子表示エリア**と**座標表示エリア**に**C原子（緑）**と**H原子（黄）**が結合した構造が出現します。

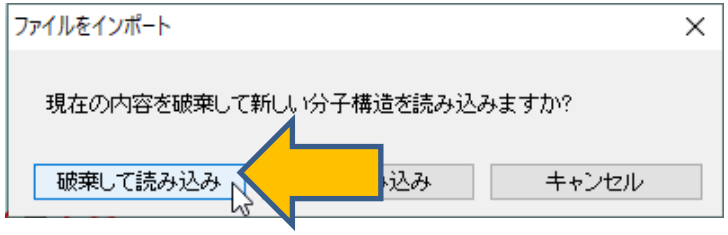


Copyright 2008-2025 X-Ability Co., Ltd.

【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。

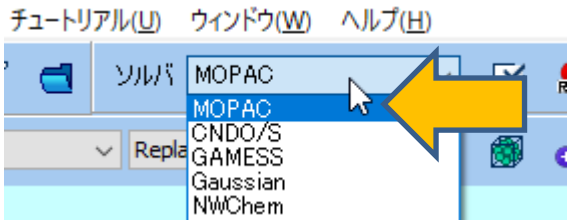


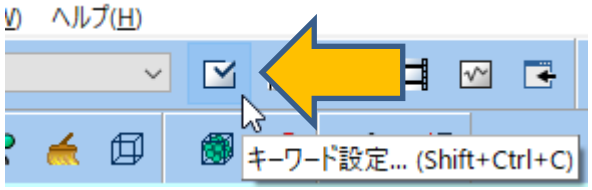


Copyright 2008-2025 X-Ability Co., Ltd.

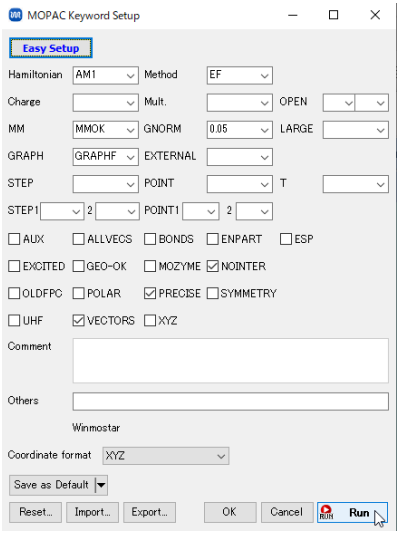
【ファイルモード】計算の実行

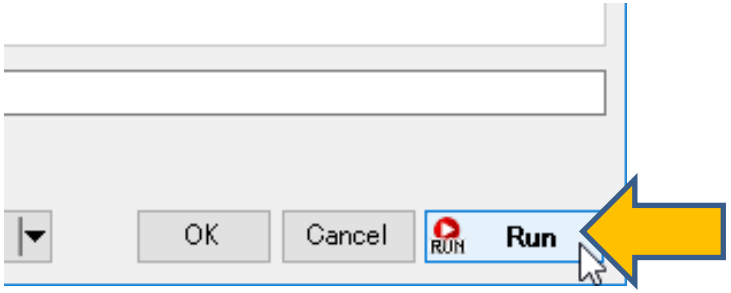
- メインウインドウ上部の**ソルバ**で「MOPAC」を選択し、**キーワード設定**をクリックします。（ボタン名はポインタを合わせると表示されます）





- **MOPAC Keyword Setup**ウイ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インドウ右下の**Run**をクリックします。

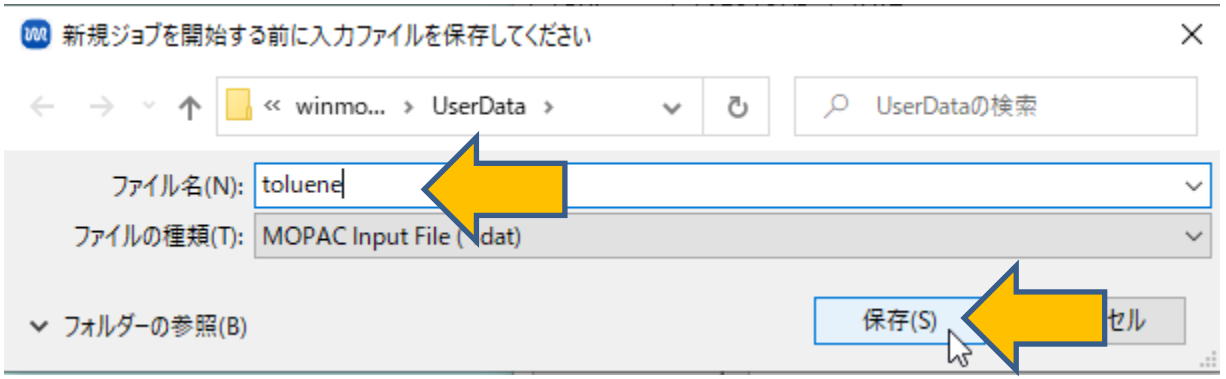




Copyright 2008-2025 X-Ability Co., Ltd.

【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。

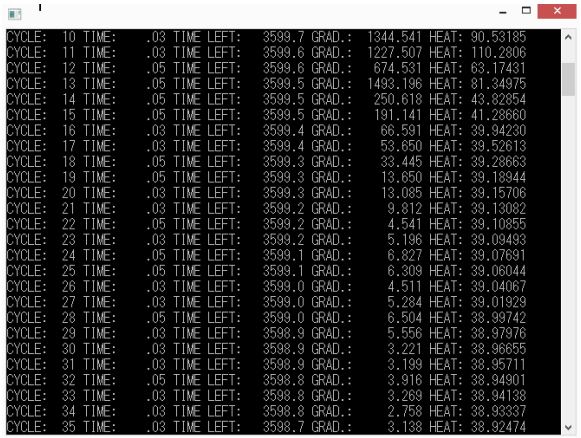


注：MOPAC, CNDO/S以外のソルバの場合は、**Winmostar Job Manager**が起動し、Winmostar Job Manager経由でジョブが実行されます。

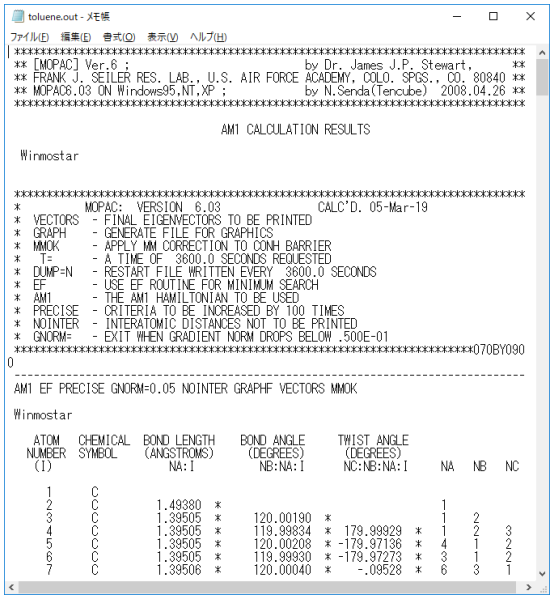
Copyright 2008-2025 X-Ability Co., Ltd.

【ファイルモード】計算の実行

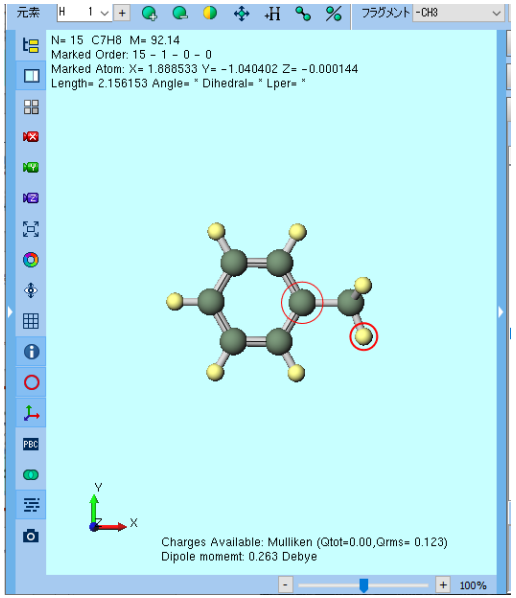
- ソルバの実行中（今回の計算では1秒もかからない）、黒いウインドウが出現します。
- 計算が完了したら自動で以下の様に動作します。（MOPAC、CNDO/S限定）
  - ログが書かれた出力ファイル（`toluene.out`）がテキストファイルで開かれます。
  - 最終構造が書かれてた出力ファイル（`toluene.arc`）がメインウインドウで開かれます。
- 計算終了後は毎回ログや最終構造を見て計算が正常終了または異常終了したか確認します。



```
CYCLE:  10 TIME:    .03 TIME LEFT:   3599.7 GRAD.:  1344.541 HEAT: 90.53185
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
```



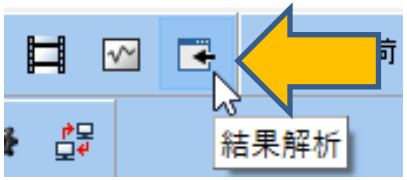
```
toluene.out - メモ帳
ファイル(F)  編集(E)  書式(O)  表示(V)  ヘルプ(H)
 ** [MOPAC] Ver.6 ;                          by Dr. James J.P. Stewart,      **
 ** FRANK J. SEILER RES. LAB., U.S. AIR FORCE ACADEMY, COLO. SPGS., CO. 80840 **
 ** MOPAC6.03 ON Windows95,NT,XP ;            by N.Senda(Tencube)  2008.04.26 **

                          AM1 CALCULATION RESULTS

 Winmostar

 *          MOPAC:  VERSION  6.03              CALC'D. 05-Mar-19
 *  VECTORS  - FINAL EIGENVECTORS TO BE PRINTED
 *  GRAPH    - GENERATE FILE FOR GRAPHICS
 *  MMOK     - APPLY MM CORRECTION TO CONH 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
 *  AM1      - THE AM1 HAMILTONIAN TO BE USED
 *  PRECISE  - CRITERIA TO BE INCREASED BY 100 TIMES
 *  NOINTER  - INTERATOMIC DISTANCES NOT TO BE PRINTED
 *  GNORM=   - EXIT WHEN GRADIENT NORM DROPS BELOW .500E-01
 *****************************************************************070BY090
0
 ---------------------------------------------------------------------------
 AM1 EF PRECISE GNORM=0.05 NOINTER GRAPHF VECTORS MMOK

 Winmostar

   ATOM   CHEMICAL  BOND LENGTH    BOND ANGLE     TWIST ANGLE
  NUMBER  SYMBOL    (ANGSTROMS)    (DEGREES)      (DEGREES)
   (I)              NA:I           NB:NA:I        NC:NB:NA:I     NA   NB   NC

     1     C
     2     C        1.49380  *                                   1
     3     C        1.39505  *     120.00190  *                  1    2
     4     C        1.39505  *     119.99834  *  179.99929  *    1    2    3
     5     C        1.39505  *     120.00208  * -179.97136  *    4    1    2
     6     C        1.39505  *     119.99930  * -179.97273  *    3    1    2
     7     C        1.39506  *     120.00040  *    -.09528  *    6    3    1
```

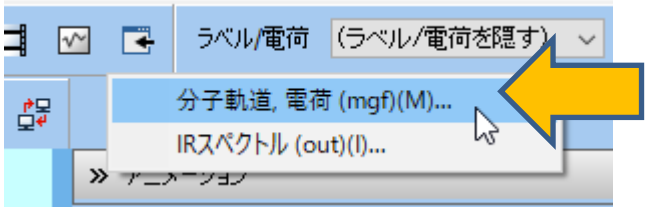


Copyright 2008-2025 X-Ability Co., Ltd.

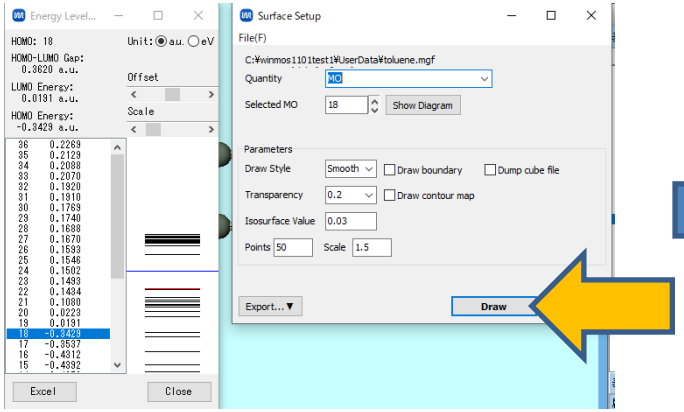
【ファイルモード】結果解析

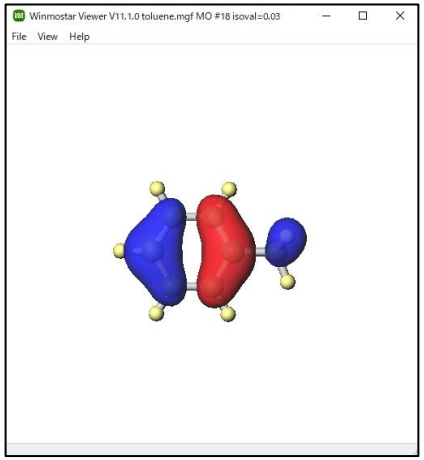
- メインウインドウ上部の**結果解析**をクリックし、 **分子軌道、電荷**をクリックすると**開く**ダイアログが開きます。デフォルトではメインウインドウで開かれているファイルに紐付けられた出力ファイル（`toluene.mgf`）が選択されるので、そのまま**開く**をクリックします。





- **Energy Level Diagram**ウインドウと**Surface Setup**ウインドウが開きます。**Surface Setup**ウインドウの**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。

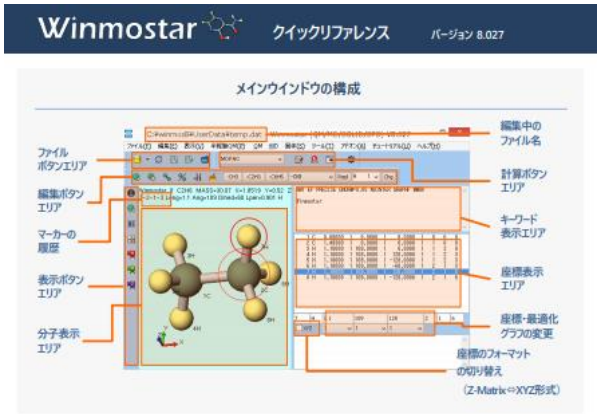




Copyright 2008-2025 X-Ability Co., Ltd.

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

Copyright 2008-2025 X-Ability Co., Ltd.