



Winmostar V11 ビギナーズガイド

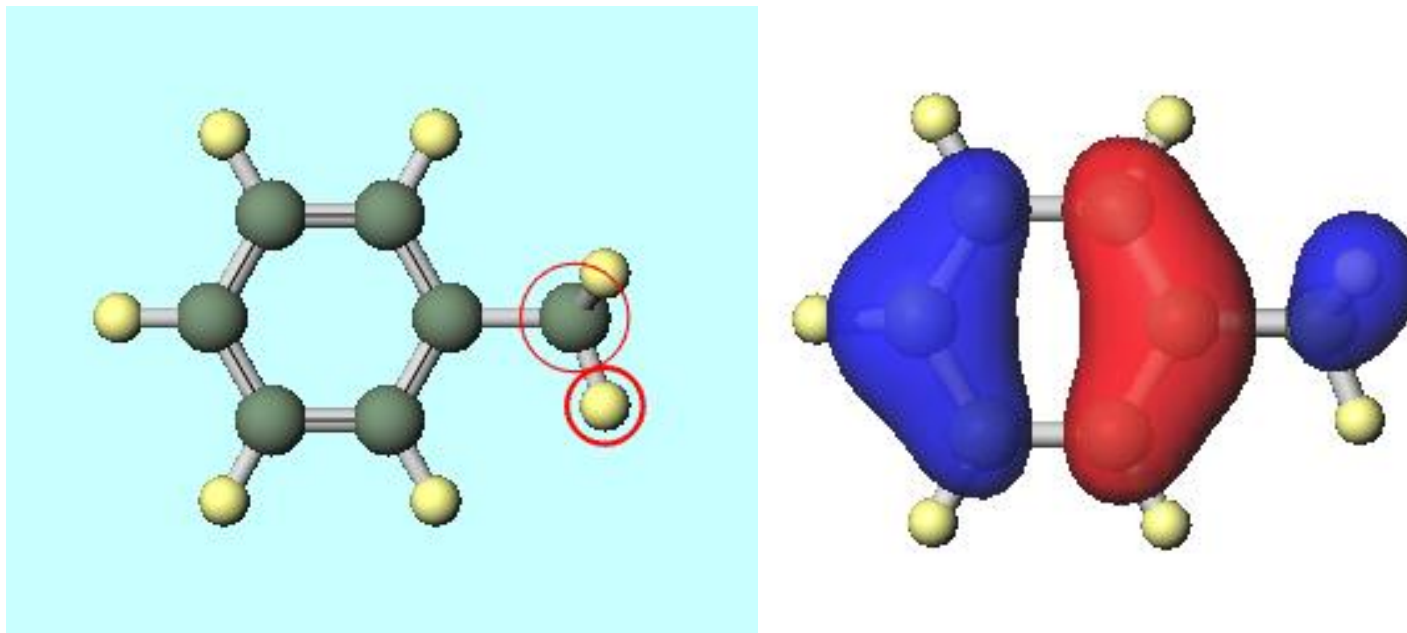
(Winmostar同梱USBメモリ向け)

V11.6.1

2023年12月14日 株式会社クロスアビリティ

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。



Winmostarのライセンス登録

- USBドライブを開き、GetLicenseをクリックしてください。メールアドレスを入力し、「**プロフェッショナル版トライアル（30日間）**」にチェックを入れ、使用規約および個人情報の取り扱いについて閲覧し同意したら**登録**をクリックします。
- USBドライブの下のWinmostarをクリックし、上で登録したメールアドレスに送られてくるライセンスコードを入力して**OK**をクリックしてください。
 - USBドライブ上のWinmostarでCygwinWMを診断またはCygwinWMのインストールテストを実行すると、USBメモリの読み書き速度が遅いため失敗することがあります。本格的に利用するときにはHDDやSSDの上にWinmostar、CygwinWM、各種ソルバをインストールして利用してください。

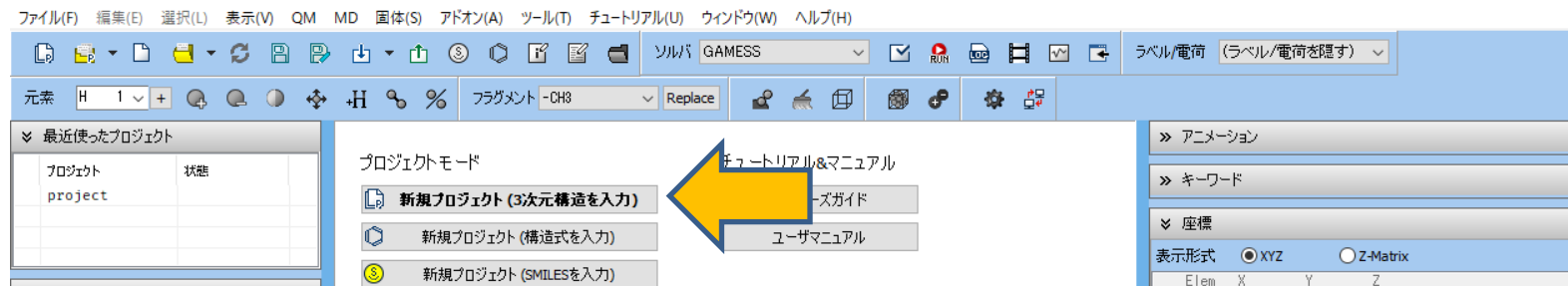
V11 無償版・学生版・プロフェッショナル版トライアル ライセンス登録

* 入力必須項目です

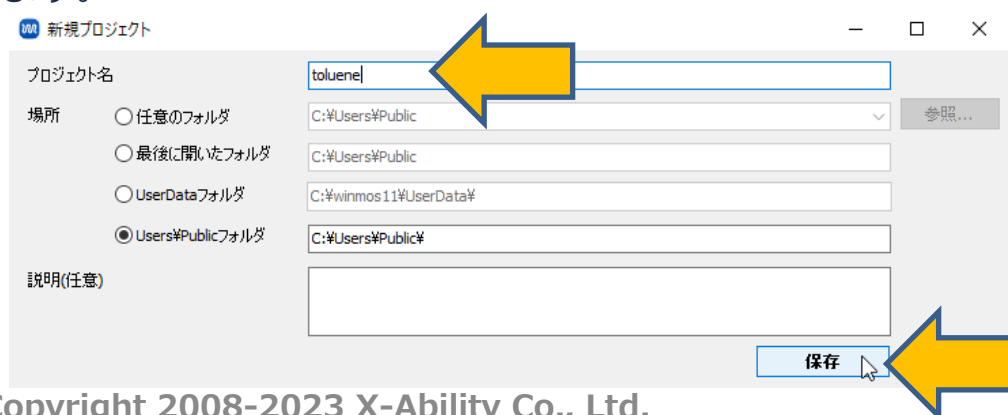
メールアドレス*	<input type="text" value="foo@bar.com"/>
ライセンス種類	<p><input type="radio"/> 無償版</p> <p><input type="radio"/> 学生版</p> <p><input checked="" type="radio"/> プロフェッショナル版トライアル(30日間)</p> <p>- 無償版、学生版およびプロフェッショナル版の利用資格・機能等の違いはこちらで確認してください。</p>
<input checked="" type="checkbox"/> 使用規約及び個人情報の取り扱いについてに同意	
<input type="button" value="登録"/>	

【プロジェクトモード】 Winmostarの起動

- 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](#)）
 - USBメモリ上に保存すると計算が遅くなるため、**場所**はデフォルトの**User¥Publicフォルダ**に設定することを推奨します。



【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

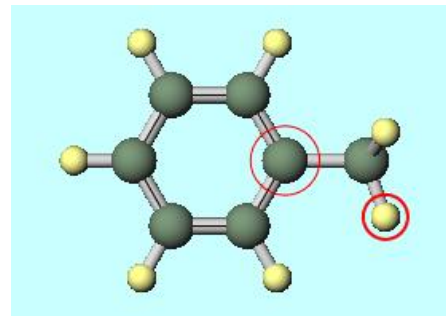
分子表示エリア
編集中の原子・分子構造が表示される

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

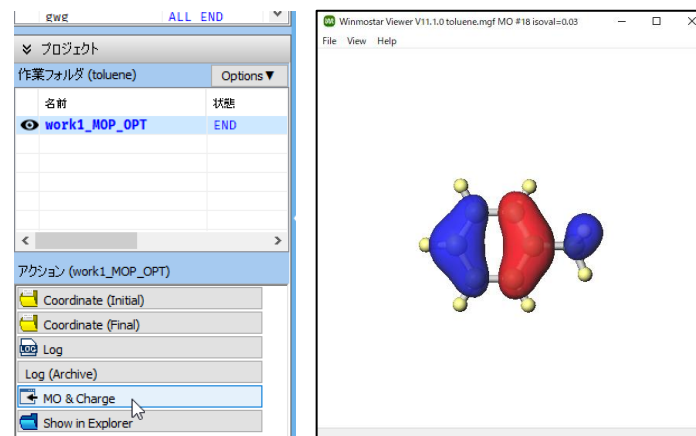
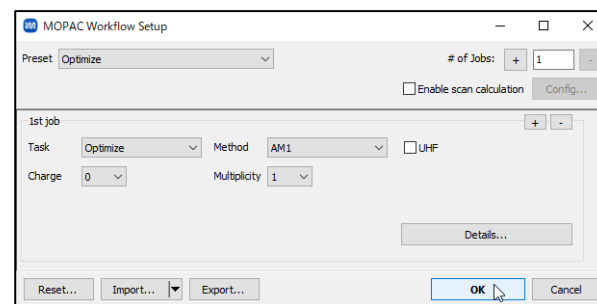
- ① 分子表示エリアに計算したい原子・分子構造を作成



- 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



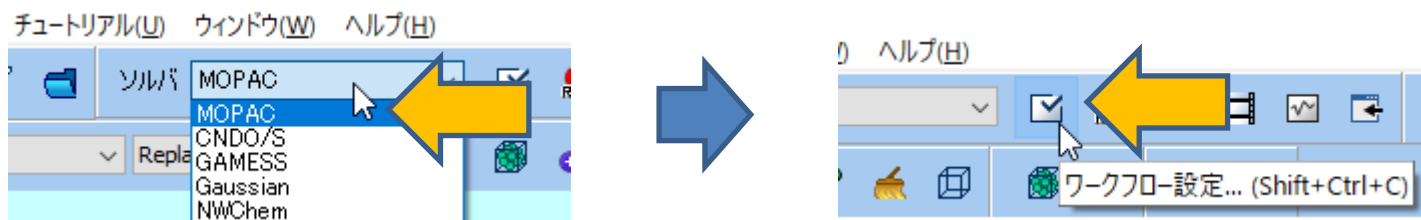
【プロジェクトモード】 分子構造の読み込み

- 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。

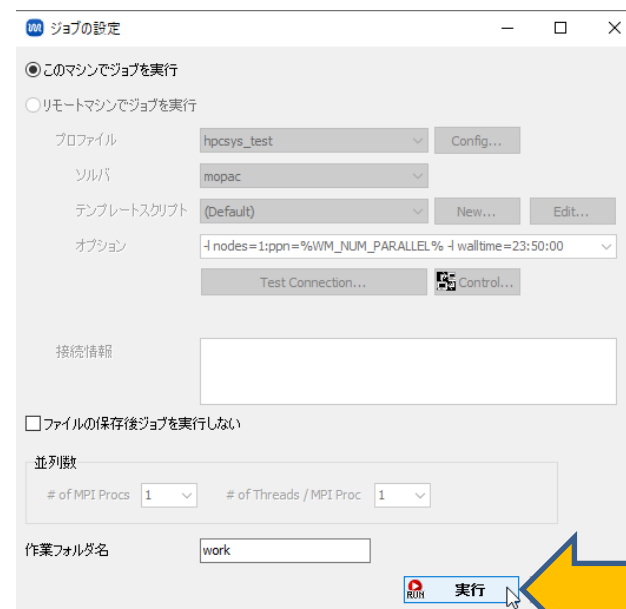
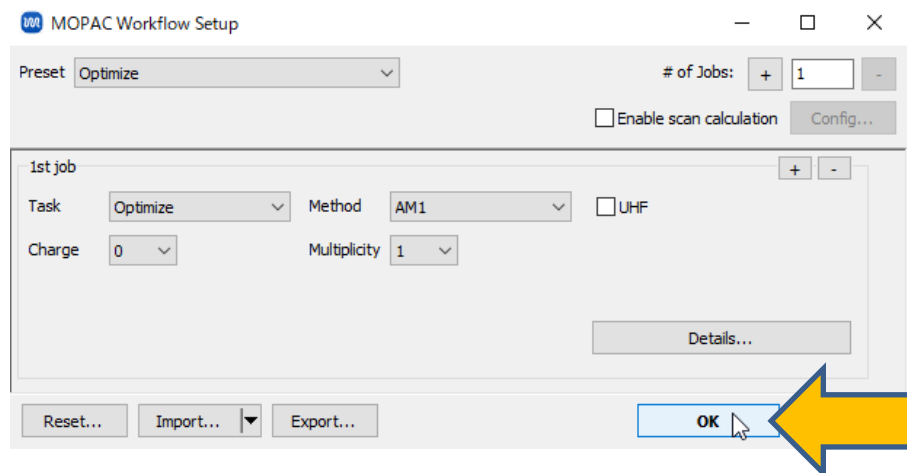
The image illustrates the workflow for loading a molecular structure file into the software. It starts with the 'File' menu where 'Import' is chosen, leading to a file selection dialog. 'toluene.mol' is selected from the list. A confirmation dialog asks if the user wants to overwrite the current content and load the new structure. The 'Overwrite and load' button is highlighted. Finally, the 3D ball-and-stick model of toluene is 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)

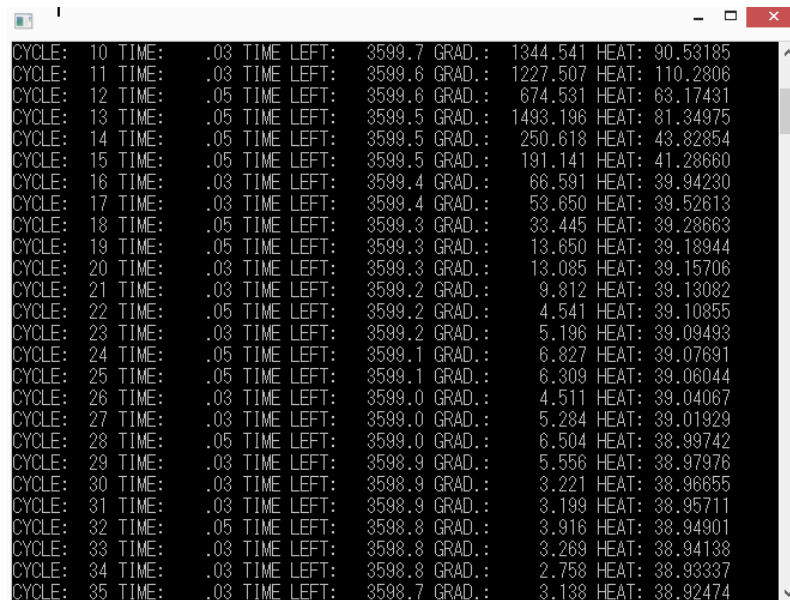


- MOPAC Workflow Setup**ウィンドウでは必要に応じて計算条件を変更します。本書ではデフォルト設定のまま**OK**をクリックします。**ジョブの設定**ウィンドウで**実行**をクリックします。

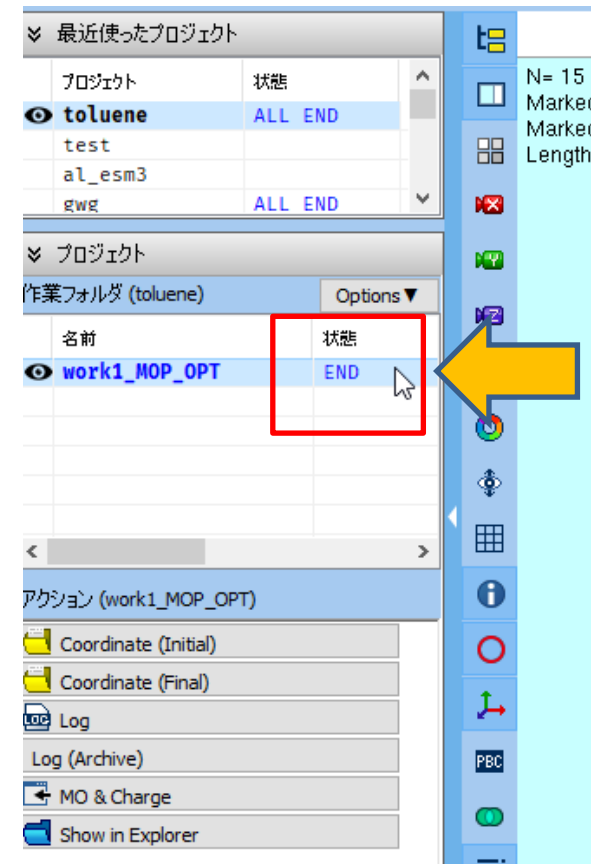


【プロジェクトモード】 計算の実行

- **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。

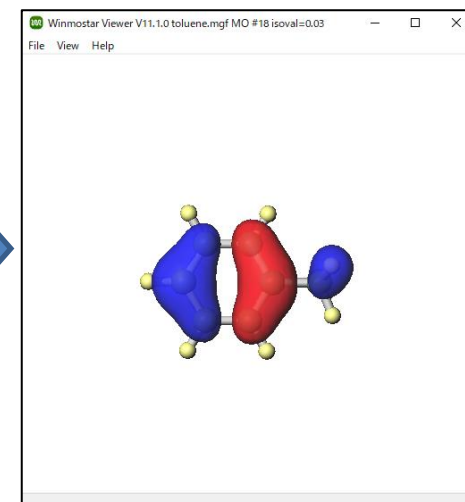
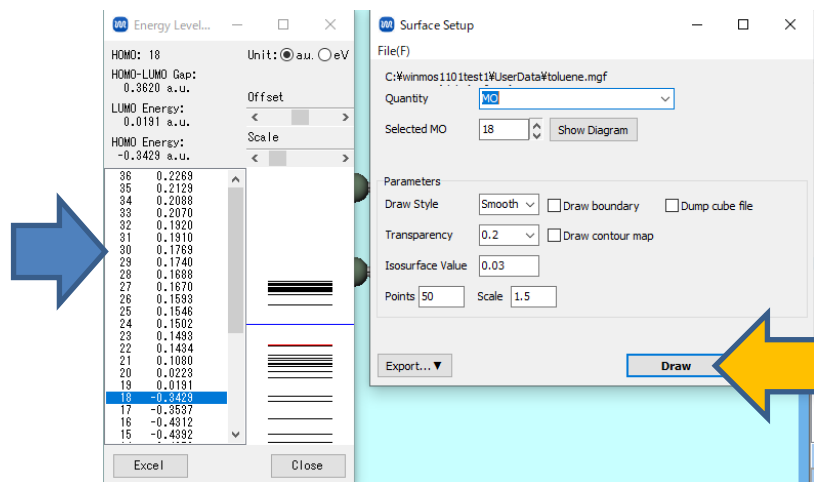
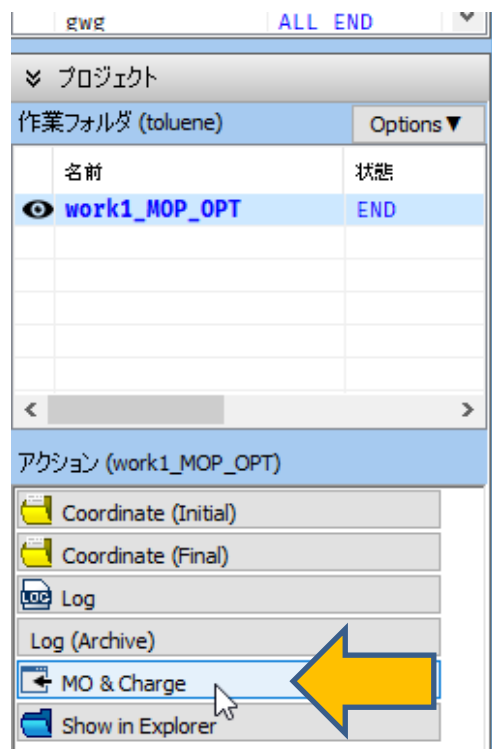


```
CYCLE: 10 TIME: .03 TIME LEFT: 3599.7 GRAD.: 1344.541 HEAT: 90.53185
CYCLE: 11 TIME: .03 TIME LEFT: 3599.6 GRAD.: 1227.507 HEAT: 110.2806
CYCLE: 12 TIME: .05 TIME LEFT: 3599.6 GRAD.: 674.531 HEAT: 63.17431
CYCLE: 13 TIME: .05 TIME LEFT: 3599.5 GRAD.: 1493.196 HEAT: 81.34975
CYCLE: 14 TIME: .05 TIME 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。



Winmostarの本格的なセットアップ方法

- USBメモリの読み書き速度が遅いため、本格的にWinmostarを利用する場合にはPC本体にWinmostarをインストールすることを推奨します。
- 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。
 - Winmostar本体とCygwinWMのインストーラはUSBメモリのinstallerフォルダに入っています。

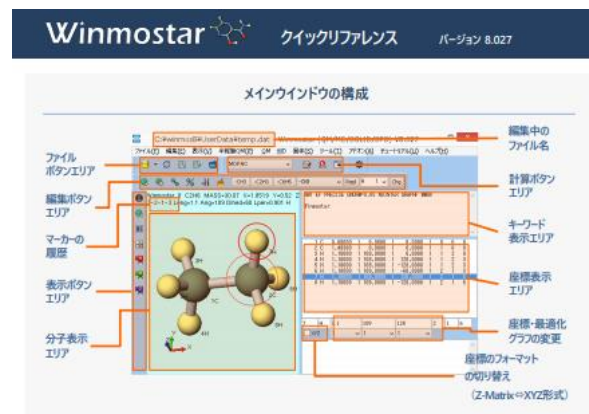
(1) **安定版最新バージョン**または**開発版最新バージョン**のWinmostarインストーラをダウンロードします。

※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

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