winmostar

Winmostar V11 ビギナーズガイド （Winmostar同梱USBメモリ向け）

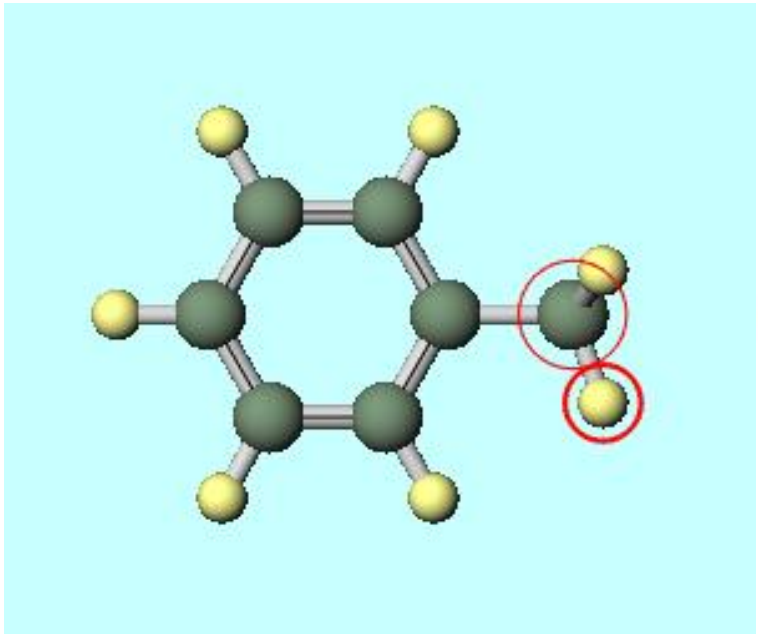
V11.6.1

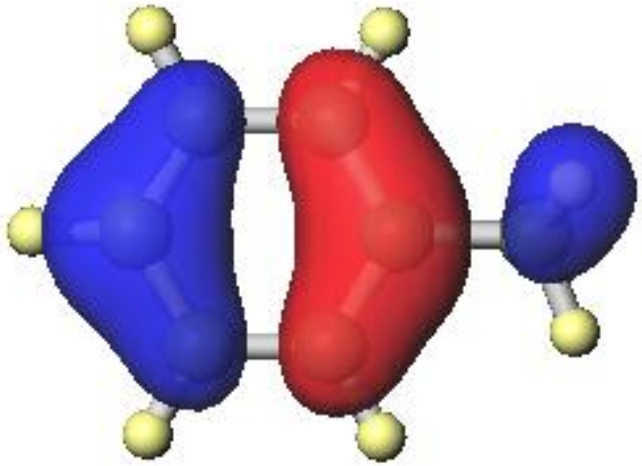
2023年12月14日　株式会社クロスアビリティ

Copyright 2008-2026 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。





Copyright 2008-2026 X-Ability Co., Ltd.

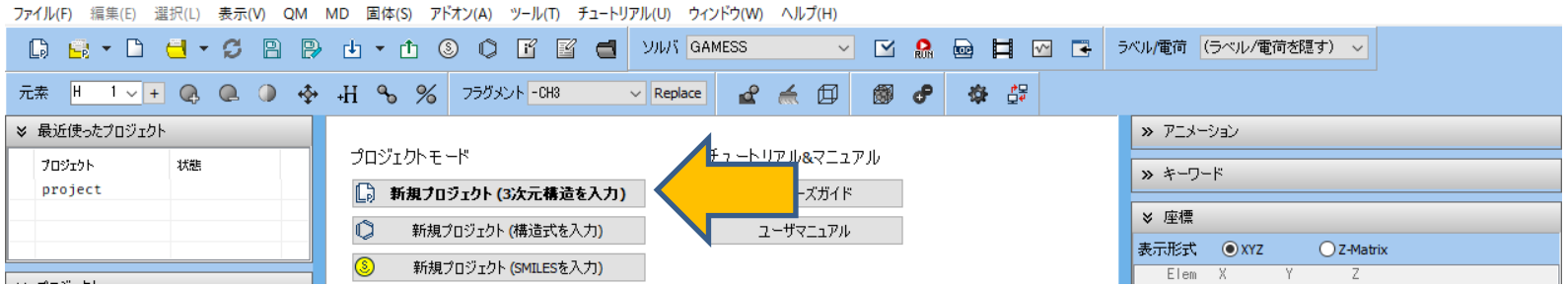
Winmostarのライセンス登録

- 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に失敗することがあります。本格的に利用するときは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。

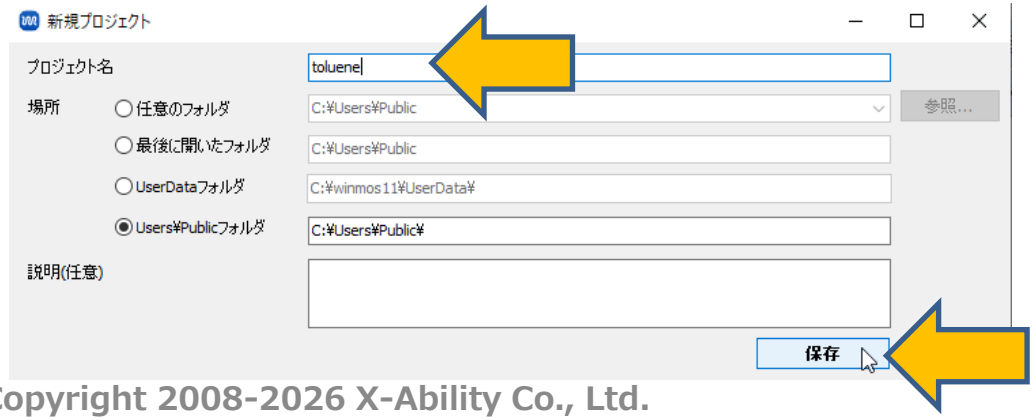
Copyright 2008-2026 X-Ability Co., Ltd.

【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。



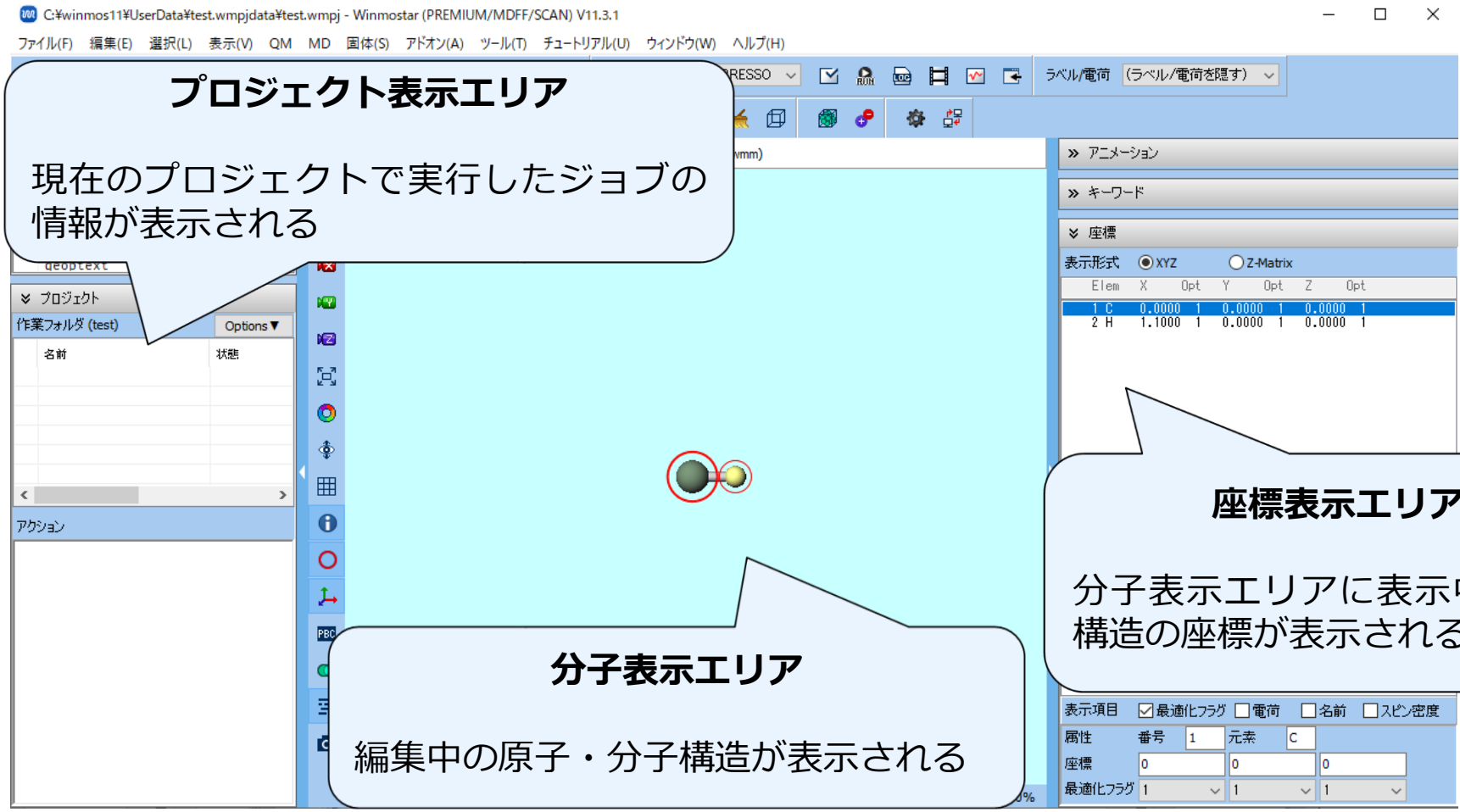
- プロジェクト名に「toluene」（半角英数字）と入力して**保存**をクリックしてください。
  - toluene.wmpjdataフォルダが作成され、このプロジェクトに関するファイルが収められます。その下にtoluene.wmpjが作成され、このプロジェクトの主要な情報が出力されます。（詳細はこちら）
  - USBメモリ上に保存すると計算が遅くなるため、**場所**はデフォルトの**User¥Publicフォルダ**に設定することを推奨します。



Copyright 2008-2026 X-Ability Co., Ltd.

【プロジェクトモード】メインウィンドウの構成

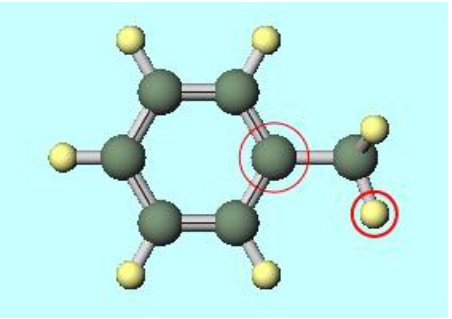
- **分子表示エリア**と**座標表示エリア**に**C原子（緑）**と**H原子（黄）**が結合した構造が出現します。



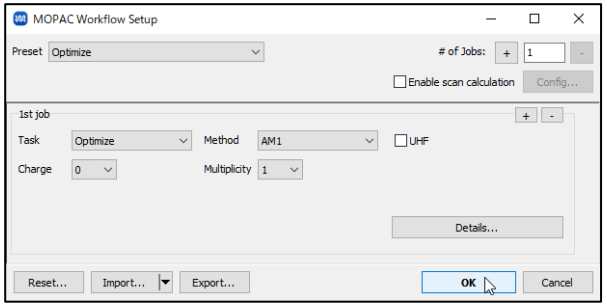
Copyright 2008-2026 X-Ability Co., Ltd.

【プロジェクトモード】操作の流れ

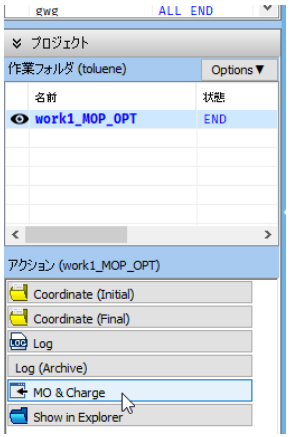
① **分子表示エリア**に計算したい原子・分子構造を作成

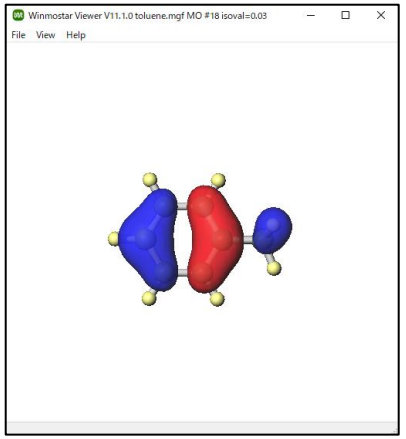


② **ワークフロー設定**で計算条件を設定し、計算を実行



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

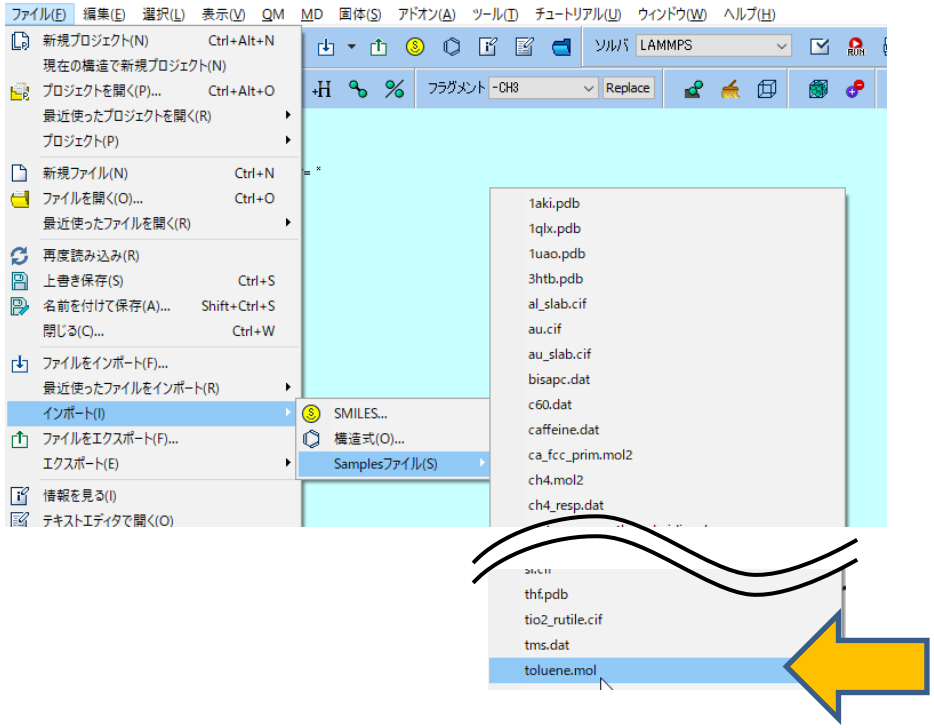


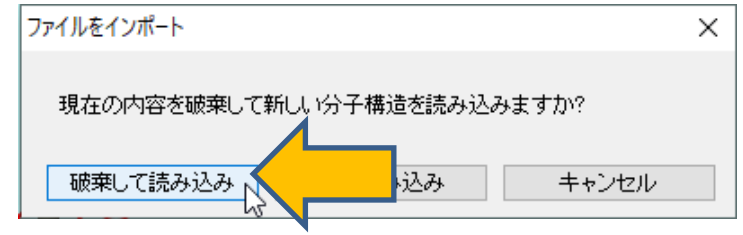


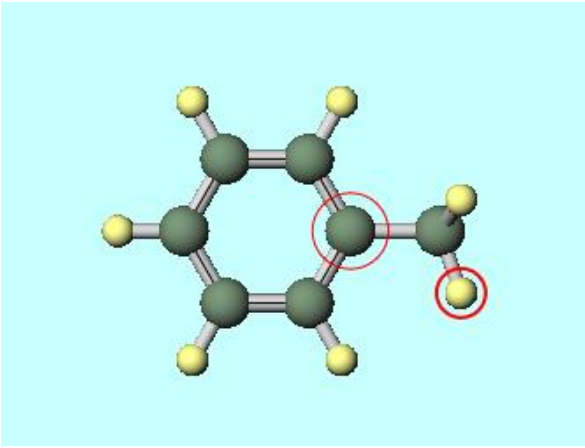
Copyright 2008-2026 X-Ability Co., Ltd.

【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。



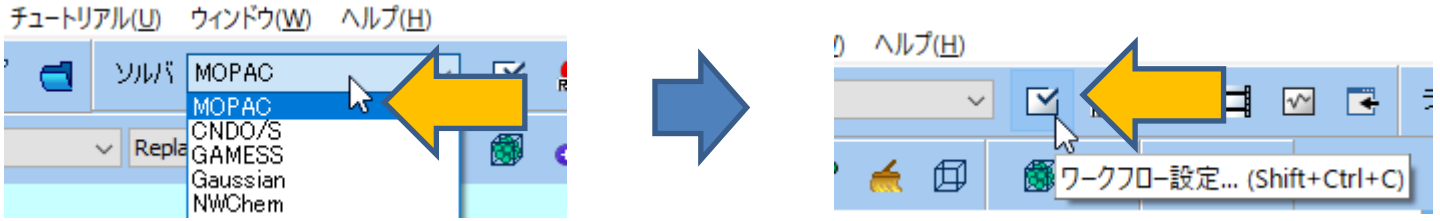




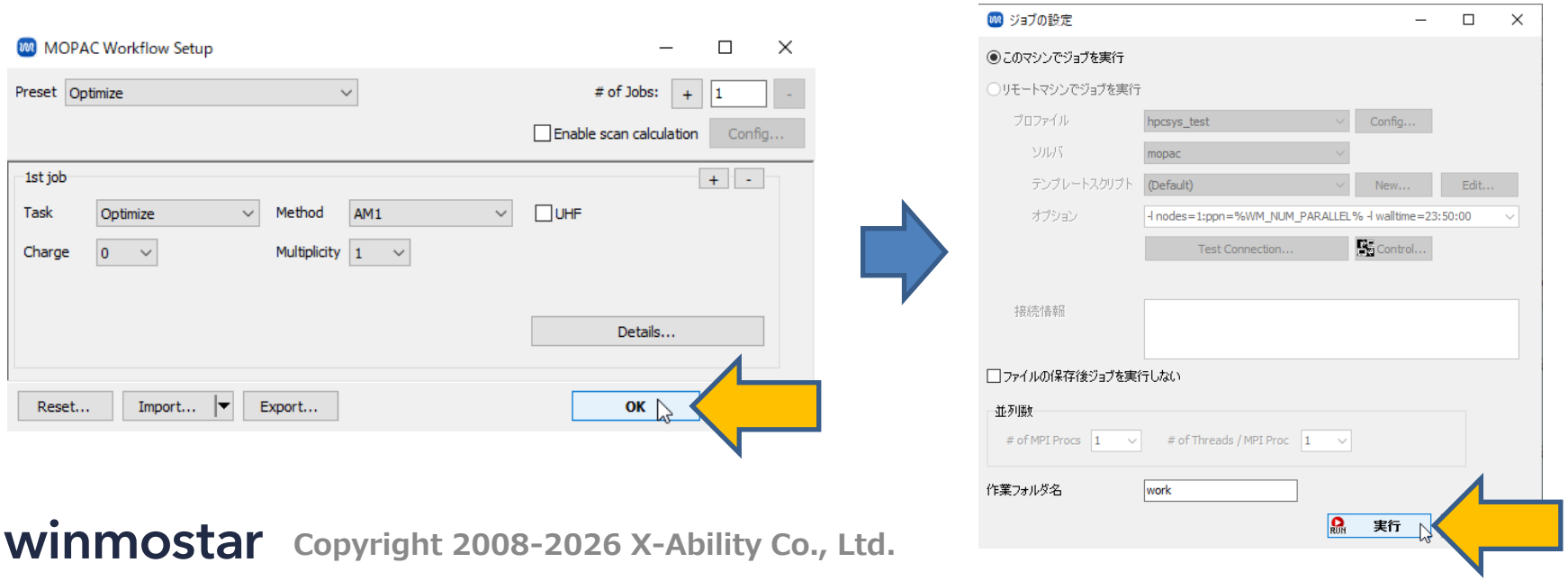
Copyright 2008-2026 X-Ability Co., Ltd.

【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）



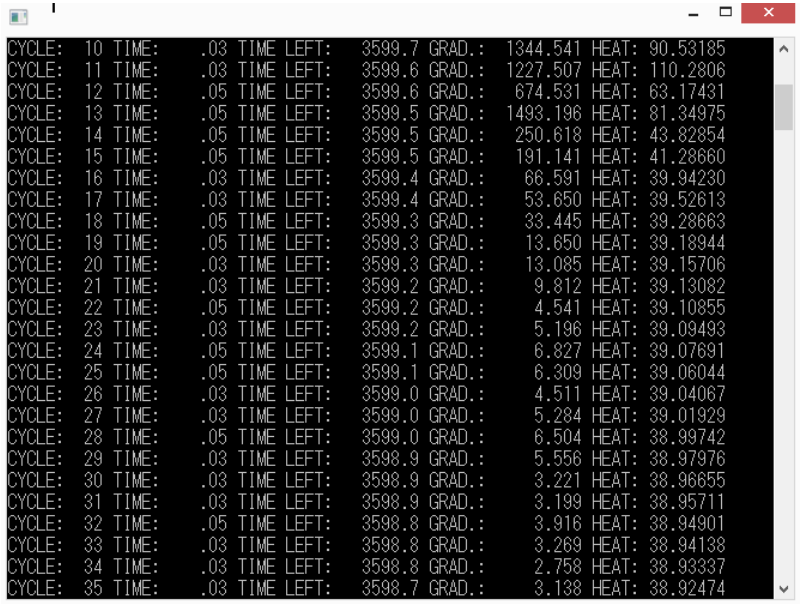
- **MOPAC Workflow Setup**ウインドウでは必要に応じて計算条件を変更します。本書ではデフォルト設定のまま**OK**をクリックします。**ジョブの設定**ウィンドウで**実行**をクリックします。

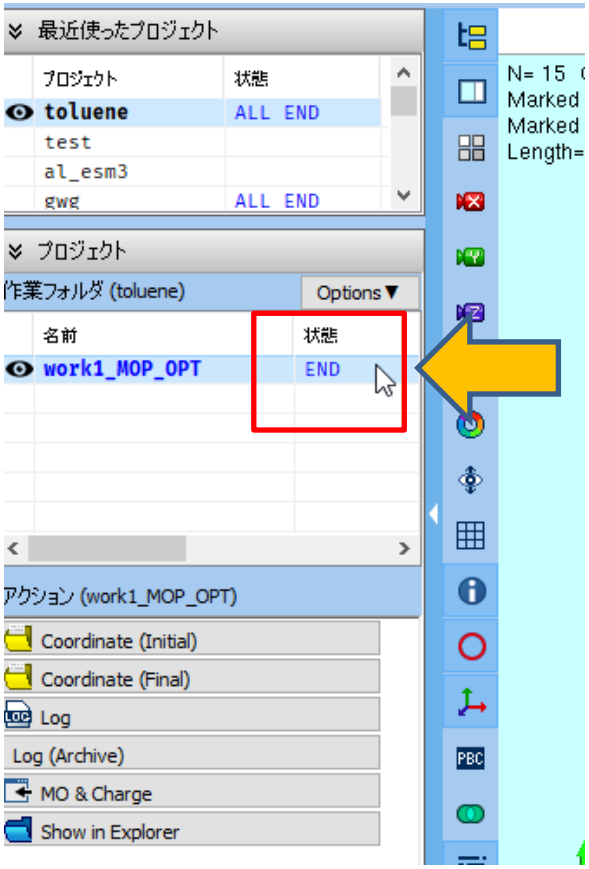


Copyright 2008-2026 X-Ability Co., Ltd.

【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。

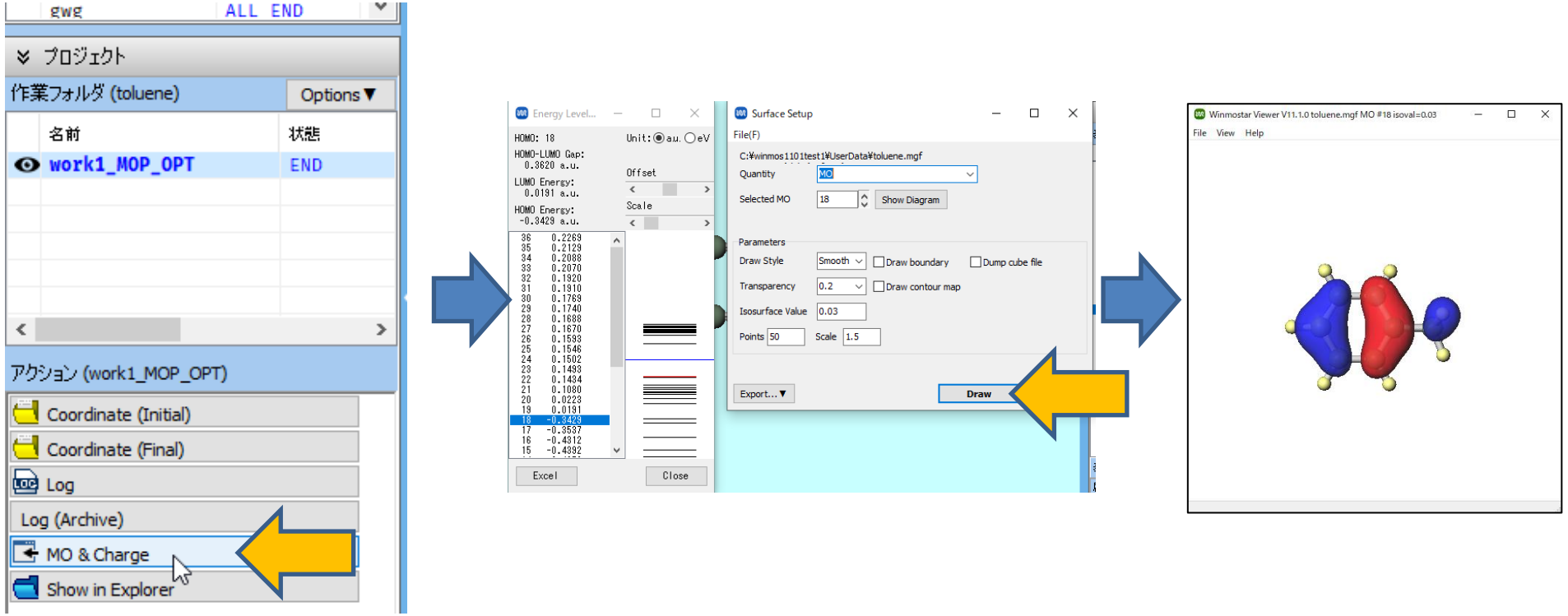




Copyright 2008-2026 X-Ability Co., Ltd.

【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 2008-2026 X-Ability Co., Ltd.

Winmostarの本格的なセットアップ方法

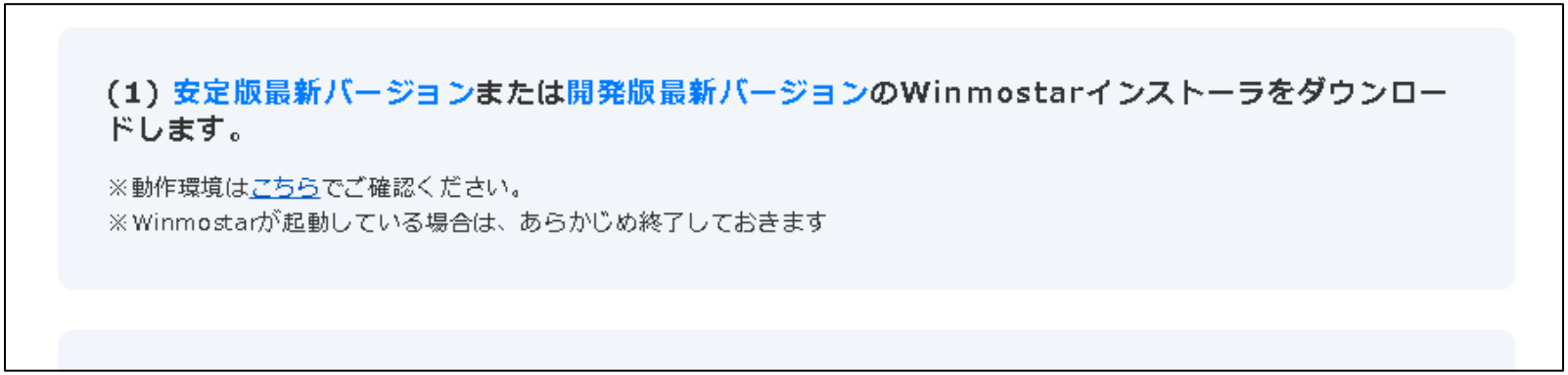
- USBメモリの読み書き速度が遅いため、本格的にWinmostarを利用する場合にはPC本体にWinmostarをインストールすることを推奨します。
- 3通りの方法から選択してください。

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**）

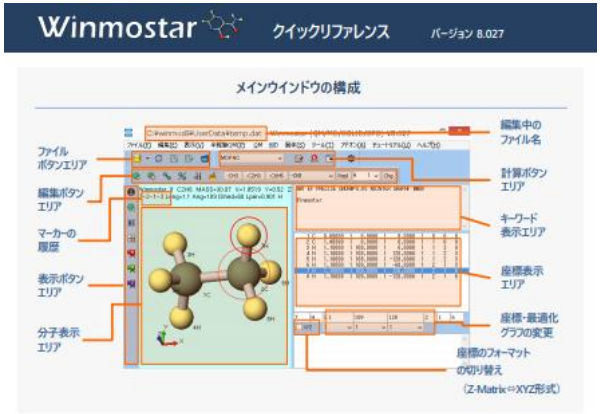
  – インストール方法　https://winmostar.com/jp/installation/
    の方法に従い、Winmostarだけでなく各種ソルバもインストールします。
  – **安定版最新バージョン**のWinmostarのインストールを推奨します。
  – Winmostar本体とCygwinWMのインストーラはUSBメモリの`installer`フォルダに入っています。



Copyright 2008-2026 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 2008-2026 X-Ability Co., Ltd.