

 winmostar チュートリアル

GAMESS/Gaussian 複数分子構造に対する自動計算

V11.4.0

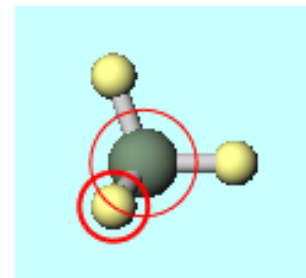
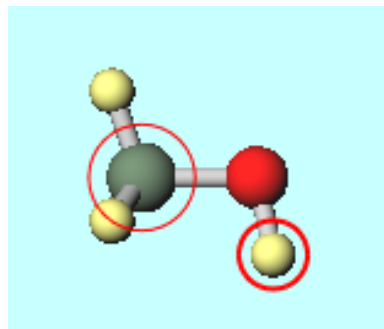
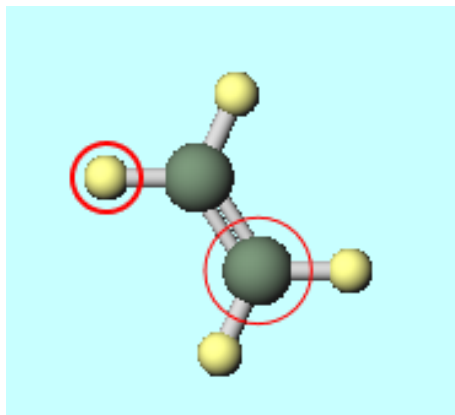
2023年1月10日 株式会社クロスアビリティ

本書について

- 本書はWinmostar V11の使用例を示すチュートリアルです。
- 初めてWinmostar V11をお使いになる方は[ビギナーズマニュアル](#)を参照してください。
- 各機能の詳細を調べたい方は[ユーザマニュアル](#)を参照してください。
- 本書の内容の実習を希望される方は、講習会を受講ください。
 - [Winmostar導入講習会](#)：基礎編チュートリアルの操作方法のみ紹介します。
 - [Winmostar基礎講習会](#)：理論的な背景、結果の解釈の解説、基礎編チュートリアルの操作方法、基礎編以外のチュートリアルの一部の操作方法を紹介します。
 - [個別講習会](#)：ご希望に応じて講習内容を自由にカスタマイズして頂けます。
- 本書の内容通りに操作が進まない場合は、まず[よくある質問](#)を参照してください。
- よくある質問で解決しない場合は、情報の蓄積・管理のため、[お問合せフォーム](#)に、不具合の再現方法とその時に生成されたファイルを添付しご連絡ください。
- 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。

概要

- 本チュートリアルの実施にはパラメータ・構造スキャンアドオンが必要です。
- SDFファイルに含まれている複数の分子構造に対してGAMESSまたはGaussianを用いて同一計算条件で自動で計算を実行する手順を示します。SDFファイルの作成方法も補足で紹介します。

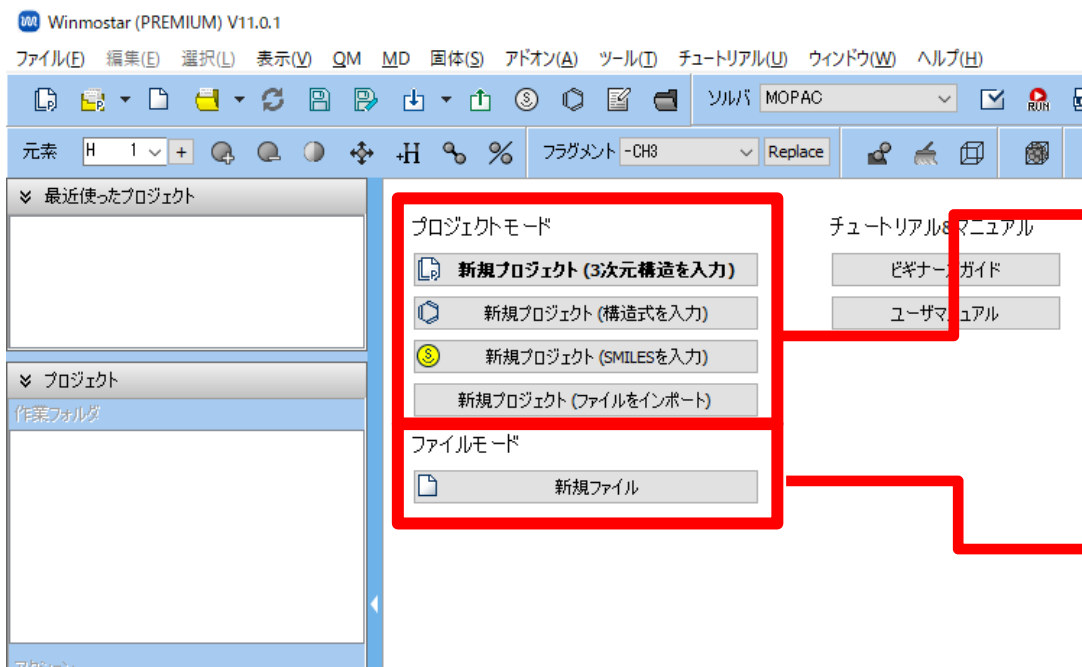


Winmostar V11の動作モード

V11には**プロジェクトモード**と**ファイルモード**の2つの動作モードが用意されています。

本書ではプロジェクトモードでの操作方法を解説します。

ファイルモードの操作方法は[V10のチュートリアル](#)を参照してください。



プロジェクトモード **V11新機能**

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。基本的にこのモードを推奨します。

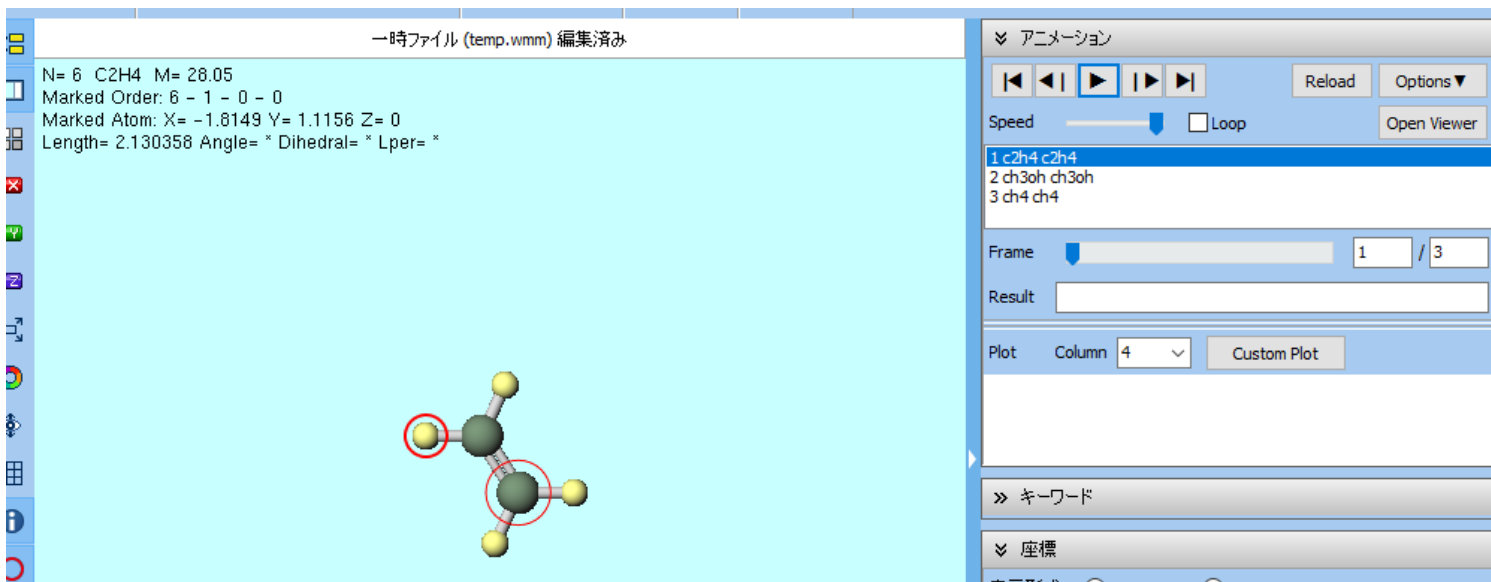
ファイルモード

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。

I. 系のモデリング

基本的な操作方法は[GAMESS基礎編チュートリアル](#)または[Gaussian基礎編チュートリアル](#)を参照してください。

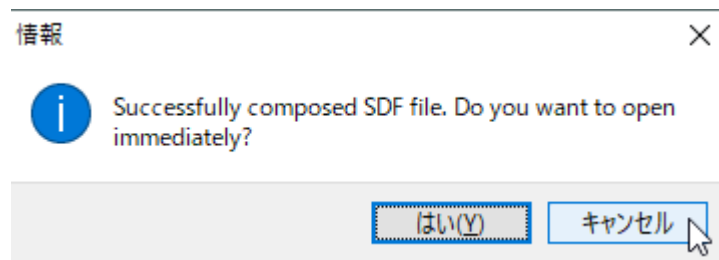
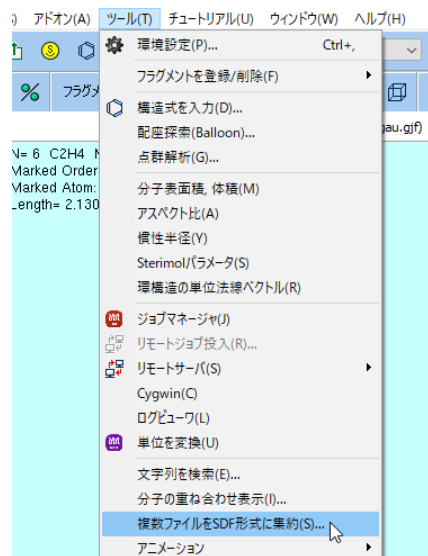
1. **ファイル | 新規プロジェクト**をクリックし、**プロジェクト名**に「qm_sdf」と入力して**保存**をクリックします。
2. **ファイル | インポート | Sampesフォルダ | small_molecules.sdf**をクリックし、「**破棄して読み込み**」をクリックします。small_molecules.sdfには3種類の分子の構造が記述されており、アニメーション操作エリアで各分子を確認することができます。
 - 任意のファイルを読み込む場合はこの段階で代わりに**ファイル | ファイルをインポート**を使います。



補足 複数の構造ファイルに対し計算したい場合

本書のチュートリアルでは、このページの手順は不要です。

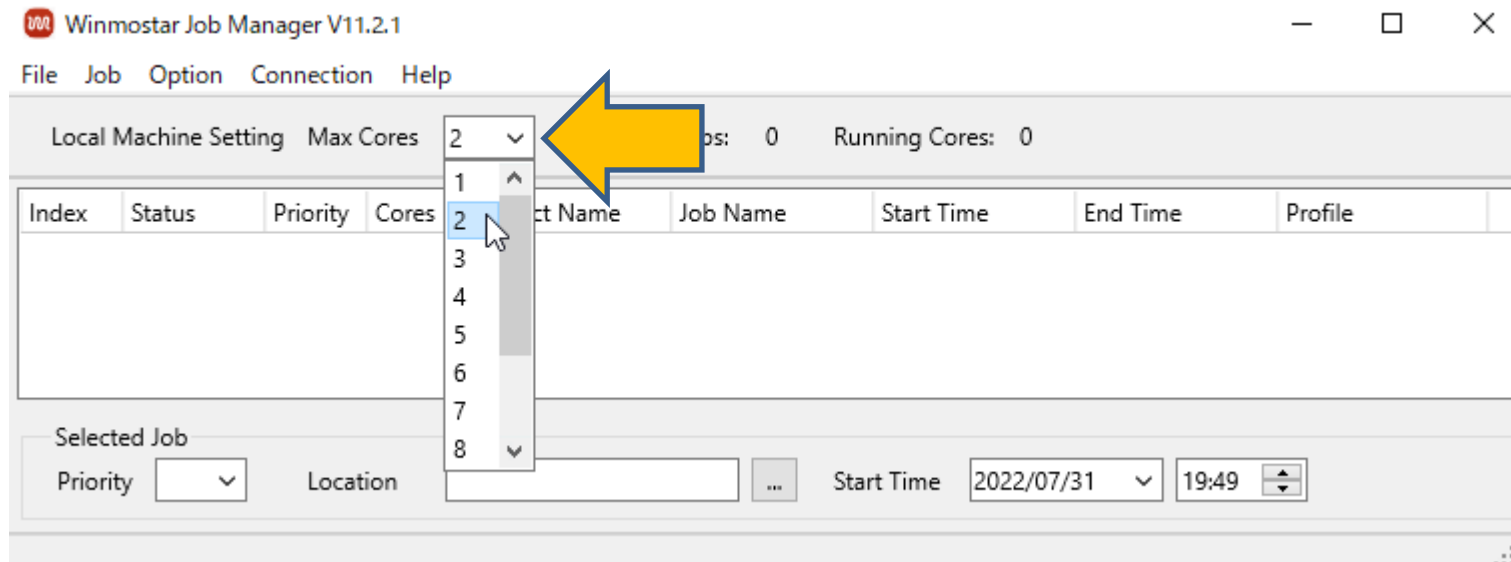
1. 計算したい分子構造がそれぞれ別々の構造ファイルに収められている場合は、まず計算したい分子構造が収められている構造ファイルを1つのフォルダにまとめてください。
2. Winmostarの**ツール | 複数ファイルをSDF形式に集約**をクリックし、1でまとめたフォルダを選択し**OK**をクリックします。
3. 保存するSDFファイルの名前を入力し**保存**をクリックします。
4. 「... Do you want to open immediately?」と表示されたら**キャンセル**をクリックします。
5. 保存したSDFファイルをP. 5の手順2でインポートします。



II. 計算の実行

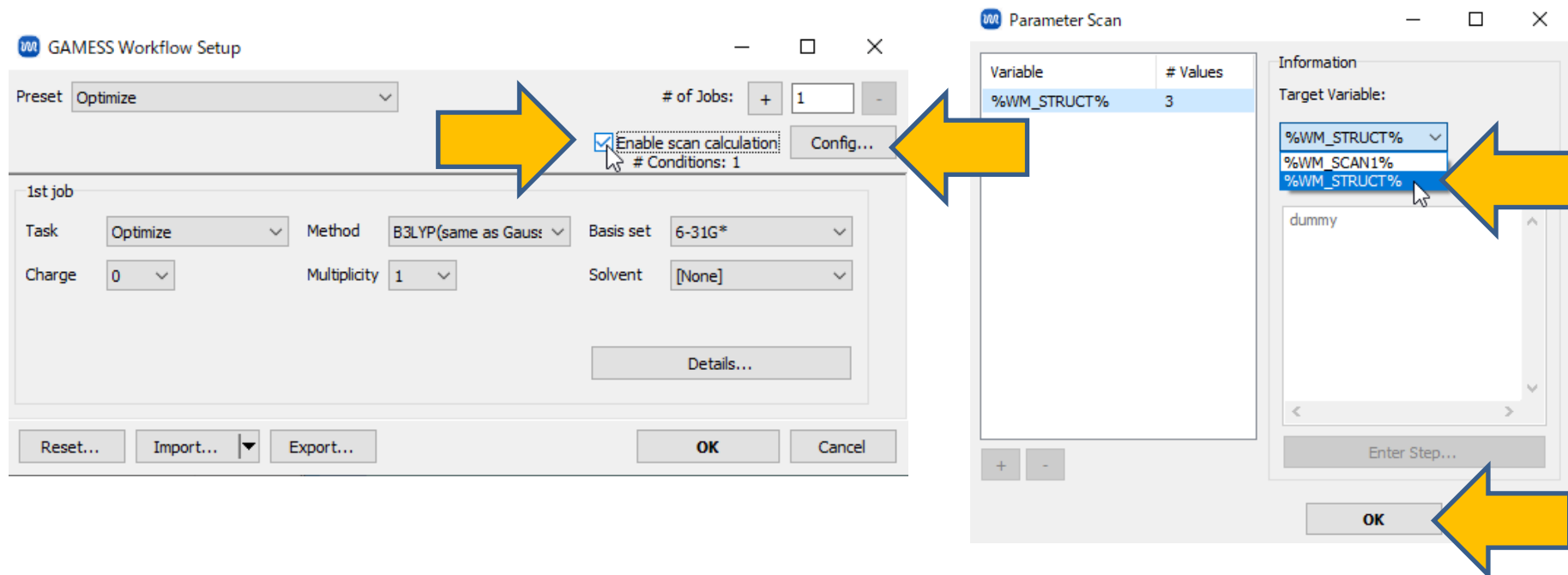
GAMESSをローカルジョブで実行したい場合は**ツール | ジョブマネージャ**をクリックし、起動した**Winmostar Job Manager**で**Local Machine Setting**の**Max Cores**の値を、これから実行するGAMESSのジョブで使用するコア数に変更します。

(Windows版GAMESSは起動処理において特定パスの一時ファイルをロックするため、GAMESSが同時に複数起動することを防ぐ必要がある。他のソルバまたはGAMESSがある程度時間を空けて複数起動する状況では不要。)



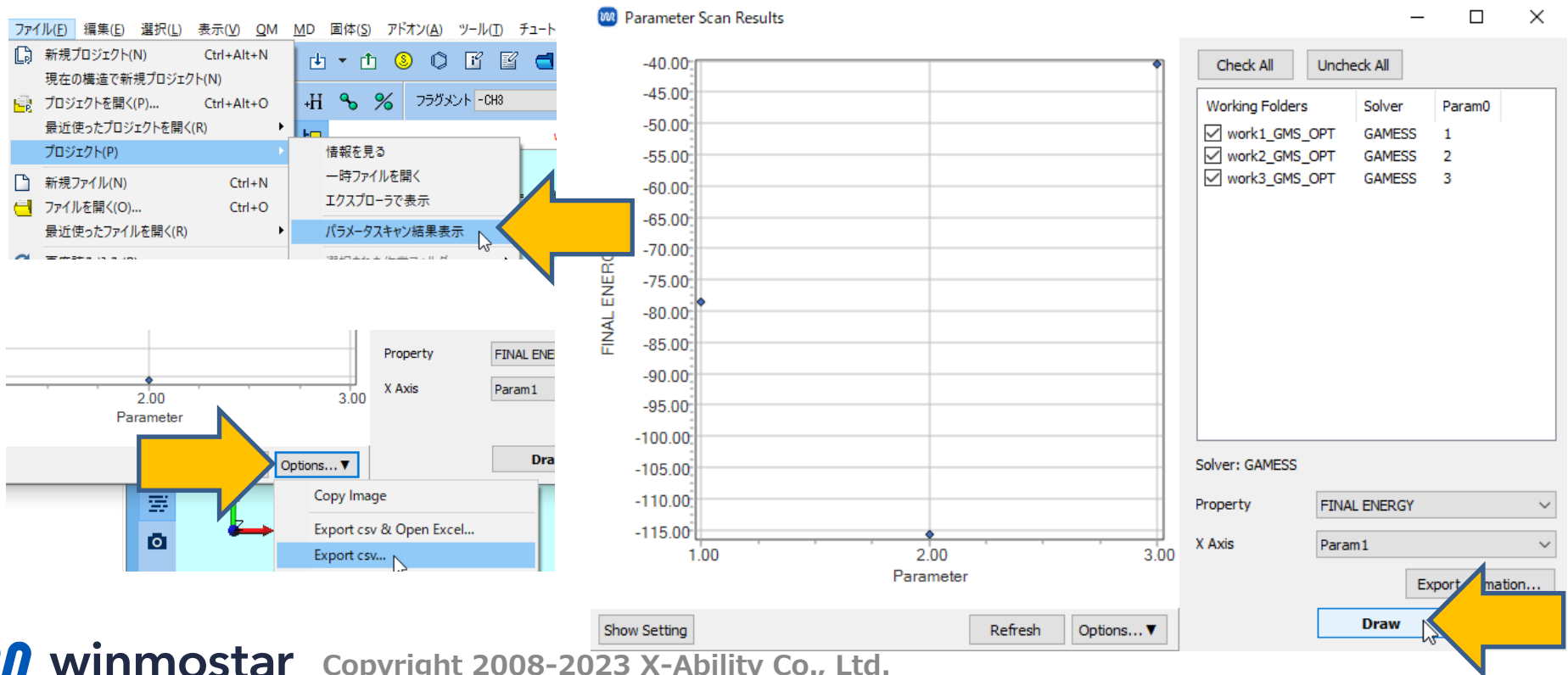
II. 計算の実行

1. ソルバを**GAMESS**または**Gaussian**に変更し、 **ワークフロー設定**をクリックし、**Enable scan calculation**にチェックを入れ、その右の**Config**をクリックします。
2. **Target Variable**を「**%WM_STRUCT%**」に変更し、**OK**をクリックします。
3. **GAMESS**（または**Gaussian**） **Workflow Setup**ウィンドウで**OK**をクリックします。
4. **ジョブの設定**ウィンドウで適宜設定して**実行**をクリックします。GAMESSでローカルジョブの場合は並列数をP. 6で設定した**Max Cores**の値に合わせます。



II. 結果解析

1. プロジェクト表示エリアの作業フォルダで全ての作業フォルダの状態が**END**に移行したら、**ファイル | プロジェクト | パラメータスキャン結果表示**をクリックします。
2. **Draw**をクリックすると、各構造の全エネルギーの値がグラフで表示されます。
3. グラフ下部の**Options...** | **Export csv...**をクリックするとグラフの内容をcsvファイルとして出力できます。



最後に

- 各機能の詳細を調べたい方は[ユーザマニュアル](#)を参照してください。



[ユーザマニュアル](#)



[Winmostar 講習会](#)の風景

- 本書の内容の実習を希望される方は、[Winmostar 導入講習会](#)、[Winmostar 基礎講習会](#)、または[個別講習会](#)の受講をご検討ください。（詳細はP.2）
- 本書の内容通りに操作が進まない場合は、まず[よくある質問](#)を参照してください。
- よくある質問で解決しない場合は、情報の蓄積・管理のため、[お問合せフォーム](#)に、不具合の再現方法とその時に生成されたファイルを添付しご連絡ください。

以上