



Winmostar V10 ビギナーズガイド

V10.0.4

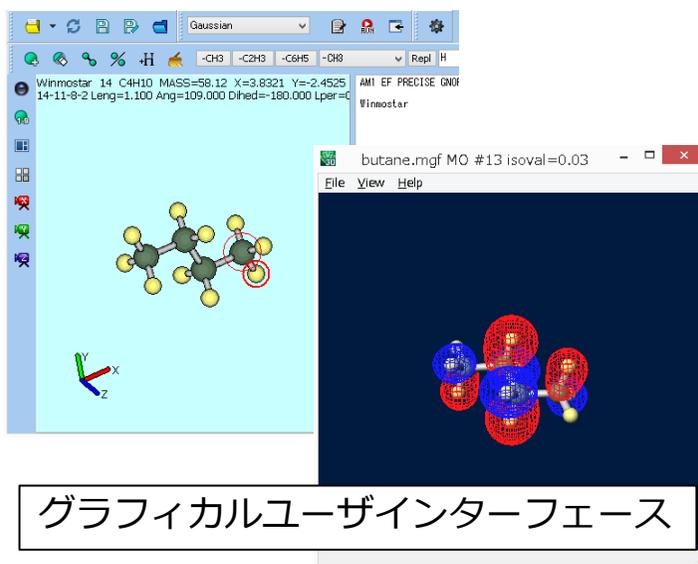
2020年4月18日 株式会社クロスアビリティ

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はMOPAC、GAMESS、Gaussian、LAMMPS、Quantum ESPRESSOなどの、通常はコンソールの操作が必要なシミュレーションソフトウェア（ソルバと呼ぶ）に対し、グラフィカルユーザーインターフェース（GUI）を提供します。
- 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。



The screenshot shows a terminal window displaying the output of a simulation. The output consists of a series of lines, each representing a cycle of simulation data. The data includes cycle number, time, time left, energy in GRAD, and heat in HEAT. The output is as follows:

```

CYCLE: 10 TIME: .03 TIME LEFT: 3589.7 GRAD.: 1344.541 HEAT: 90.53185
CYCLE: 11 TIME: .03 TIME LEFT: 3589.6 GRAD.: 1227.507 HEAT: 110.2806
CYCLE: 12 TIME: .05 TIME LEFT: 3589.6 GRAD.: 674.531 HEAT: 63.17451
CYCLE: 13 TIME: .05 TIME LEFT: 3589.5 GRAD.: 1493.196 HEAT: 81.34975
CYCLE: 14 TIME: .05 TIME LEFT: 3589.5 GRAD.: 250.618 HEAT: 43.82854
CYCLE: 15 TIME: .05 TIME LEFT: 3589.5 GRAD.: 191.141 HEAT: 41.28860
CYCLE: 16 TIME: .03 TIME LEFT: 3589.4 GRAD.: 86.591 HEAT: 39.94230
CYCLE: 17 TIME: .03 TIME LEFT: 3589.4 GRAD.: 53.650 HEAT: 39.52613
CYCLE: 18 TIME: .05 TIME LEFT: 3589.3 GRAD.: 33.445 HEAT: 39.28883
CYCLE: 19 TIME: .05 TIME LEFT: 3589.3 GRAD.: 13.650 HEAT: 39.18944
CYCLE: 20 TIME: .03 TIME LEFT: 3589.3 GRAD.: 13.085 HEAT: 39.15706
CYCLE: 21 TIME: .03 TIME LEFT: 3589.2 GRAD.: 9.812 HEAT: 39.13082
CYCLE: 22 TIME: .05 TIME LEFT: 3589.2 GRAD.: 4.541 HEAT: 39.10885
CYCLE: 23 TIME: .03 TIME LEFT: 3589.1 GRAD.: 5.196 HEAT: 39.09483
CYCLE: 24 TIME: .05 TIME LEFT: 3589.1 GRAD.: 6.827 HEAT: 39.07891
CYCLE: 25 TIME: .05 TIME LEFT: 3589.1 GRAD.: 6.309 HEAT: 39.06044
CYCLE: 26 TIME: .03 TIME LEFT: 3589.0 GRAD.: 4.511 HEAT: 39.04067
CYCLE: 27 TIME: .03 TIME LEFT: 3589.0 GRAD.: 5.284 HEAT: 39.01929
CYCLE: 28 TIME: .05 TIME LEFT: 3589.0 GRAD.: 6.504 HEAT: 39.99742
CYCLE: 29 TIME: .03 TIME LEFT: 3588.9 GRAD.: 5.556 HEAT: 39.97976
CYCLE: 30 TIME: .03 TIME LEFT: 3588.9 GRAD.: 3.221 HEAT: 39.96855
CYCLE: 31 TIME: .03 TIME LEFT: 3588.9 GRAD.: 3.199 HEAT: 39.95711
CYCLE: 32 TIME: .05 TIME LEFT: 3588.8 GRAD.: 3.916 HEAT: 39.94901
CYCLE: 33 TIME: .03 TIME LEFT: 3588.8 GRAD.: 3.269 HEAT: 39.94138
CYCLE: 34 TIME: .03 TIME LEFT: 3588.8 GRAD.: 2.758 HEAT: 39.93327
CYCLE: 35 TIME: .03 TIME LEFT: 3588.8 GRAD.: 2.738 HEAT: 39.92474

```

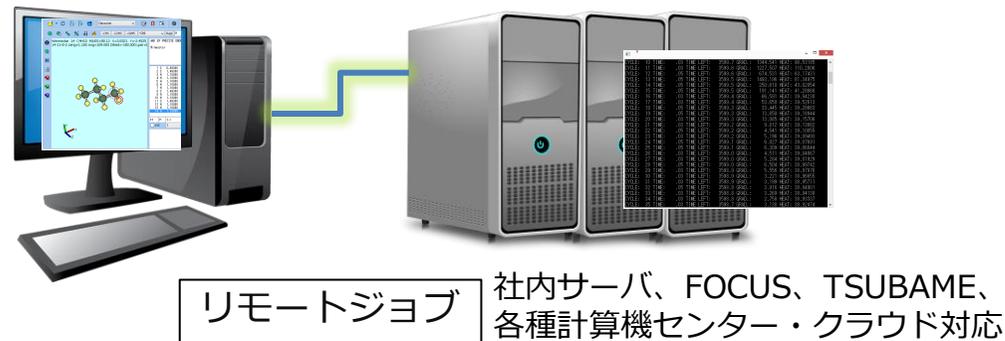
コンソール

Winmostarの基本動作

- Winmostarの主要な機能は以下の3つです。

1. 各種ソルバの入力ファイルを作成
2. 各種ソルバを実行（起動）してシミュレーションを実施
3. シミュレーション結果を解析および可視化

- ソルバを、Winmostarが動作するWindows PC上で実行するか（ローカルジョブと呼ぶ）、ネットワーク上のLinuxサーバ上で実行するか（リモートジョブと呼ぶ）選ぶことができます。



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 V10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。

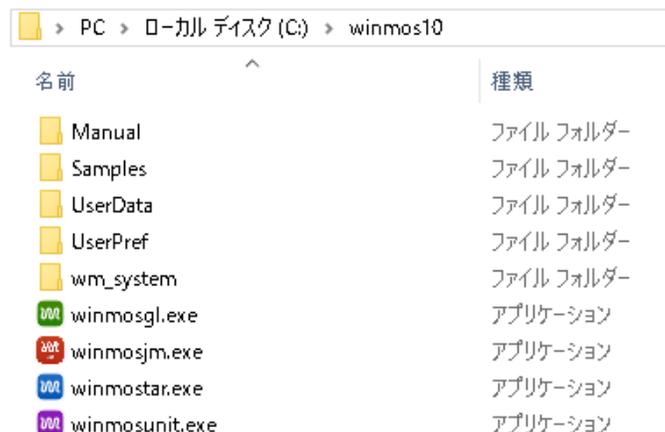
(1) **安定版最新バージョン**または**開発版最新バージョン**のWinmostarインストーラをダウンロードします。

※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



Winmostarの起動

- winmostar.exeまたはそのショートカットをダブルクリックすると、メインウィンドウが開きます。
- 起動直後、**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）**が結合した分子が、**キーワード表示エリア**にはMOPACの構造最適化計算用のキーワードが出現します。

The screenshot shows the Winmostar software interface. The main window is titled "Winmostar (QM/MD/SOLID/SCG) V10.0.0". The menu bar includes "ファイル(F)", "編集(E)", "選択(L)", "表示(V)", "半経験QM(P)", "QM", "MD", "固体(S)", "アドオン(A)", "ツール(T)", "チュートリアル(U)", "ウィンドウ(W)", and "ヘルプ(H)". The toolbar contains various icons for file operations and calculations. The main display area is divided into several sections:

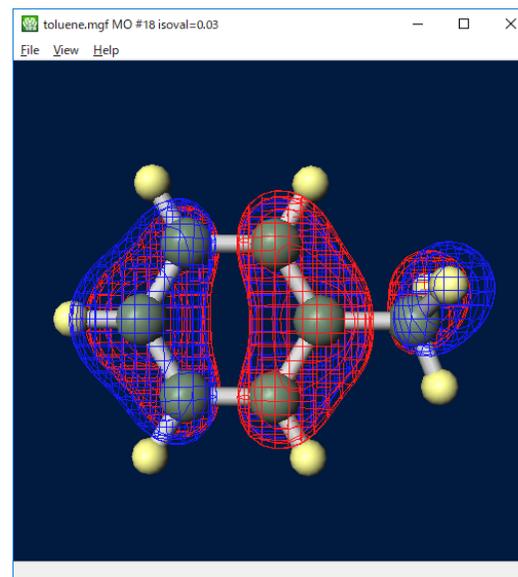
- 分子表示エリア (Molecular Display Area):** Located on the left, it shows a ball-and-stick model of a molecule (CH₂) with a carbon atom (green) and two hydrogen atoms (yellow). A callout box points to this area with the text: "分子表示エリア 編集集中の原子・分子構造が表示される".
- キーワード表示エリア (Keyword Display Area):** Located on the right, it displays the input file for the calculation in MOPAC format. A callout box points to this area with the text: "キーワード表示エリア 分子表示エリアに表示中の分子構造を実際に計算する際の計算条件が、選択されたソルバの入力ファイルの形式で表示される".
- 座標表示エリア (Coordinate Display Area):** Located at the bottom right, it displays the Z-Matrix or XYZ coordinates of the atoms. A callout box points to this area with the text: "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Z-MatrixまたはXYZ形式で表示される".

A callout box at the bottom center of the interface reads: "メインウィンドウの構成" (Main Window Structure).

Z-Matrix	XYZ
1 C	0.00000 1 0.0000 1 0.0000
2 H	1.10000 1 0.0000 1 0.0000

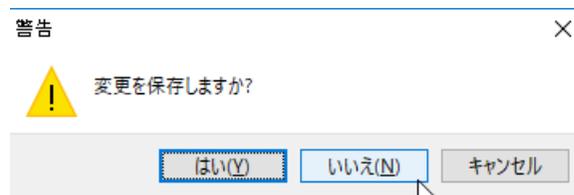
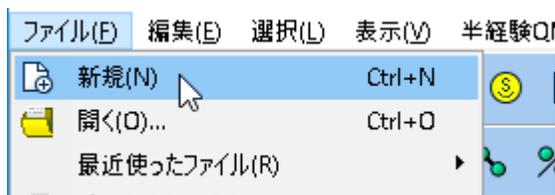
例題：トルエン分子のMO計算

- 最初の例題として、孤立したトルエン分子の分子軌道を、MOPACを用いて計算します。
 - MOPACは半経験的量子化学計算のソルバの一つです。
 - トルエン分子の電子状態を計算し、HOMO準位の分子軌道を可視化します。

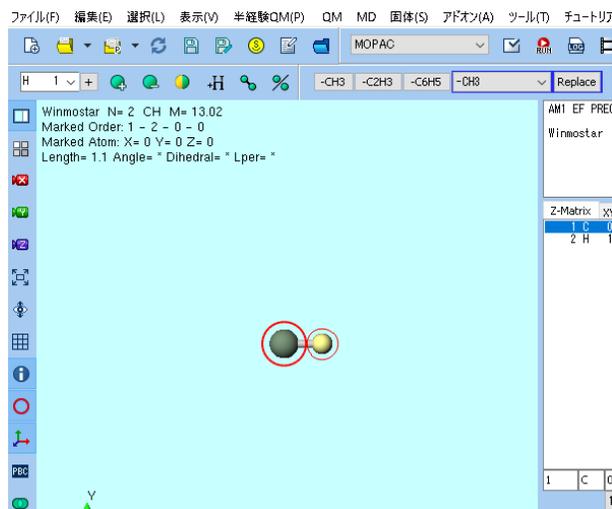


例題：トルエン分子のMO計算（モデリング）

- まずトルエン分子の構造を作成します（**モデリング**と呼ぶ）。
- メインウィンドウのメニューの[ファイル]-[新規]をクリックします。
 - 「変更を保存しますか？」と聞かれたら[いいえ]をクリックします。

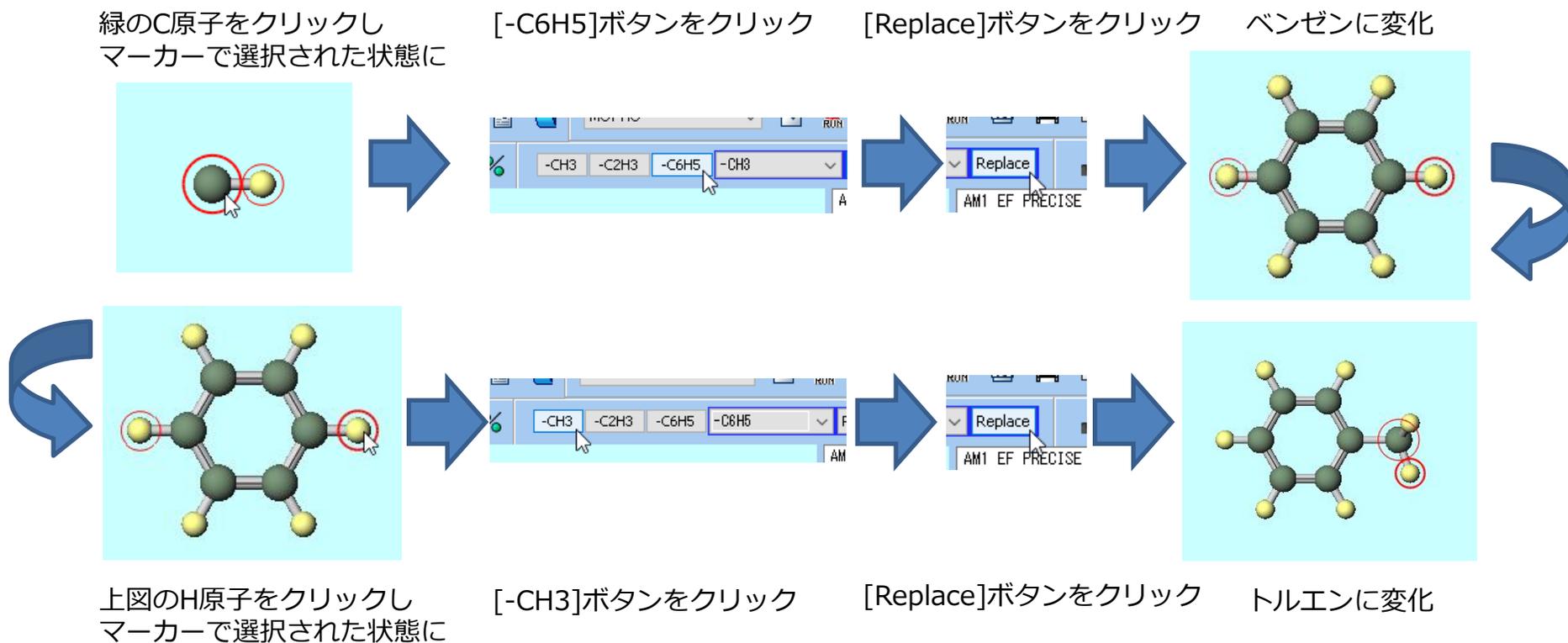


- メインウィンドウが初期状態に戻ります。



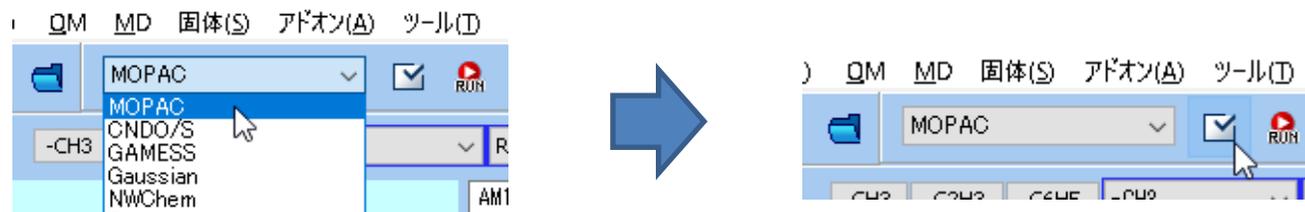
例題：トルエン分子のMO計算（モデリング）

- 分子表示エリアで、太い赤丸（**マーカー**と呼ぶ）で選択した原子を様々な原子団（置換基）に置換していくことでトルエン分子をモデリングします。



例題：トルエン分子のMO計算（キーワード設定）

- MOPACの計算条件（**キーワード**と呼ぶ）を設定します。
- メインウィンドウ上部の[ソルバープログラム]プルダウンでMOPACを選択し、その右にある[キーワード設定]ボタンを押します。（ボタン名はポインタを合わせると表示されます）

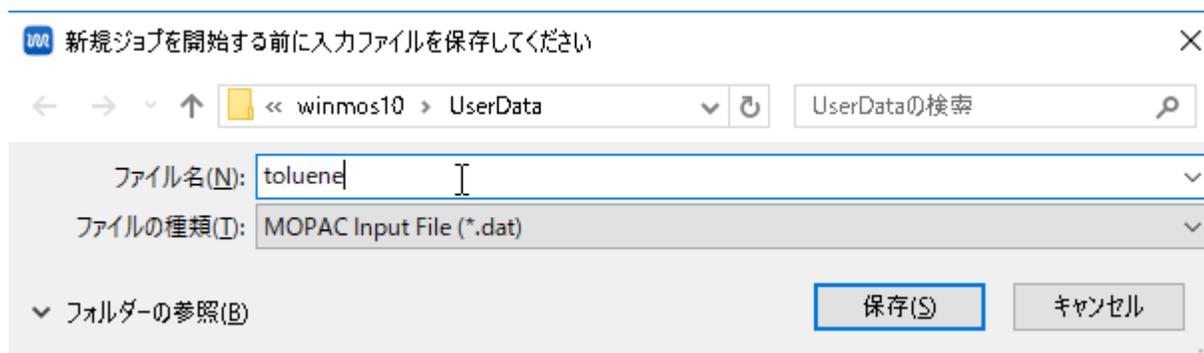


- 開いたMOPAC Setupウィンドウで計算条件に応じてキーワードを変更することが可能ですが、ここではデフォルトの設定を使うので何も変更せずウィンドウ右下の[Run]ボタンを押します。



例題：トルエン分子のMO計算（ソルバの実行）

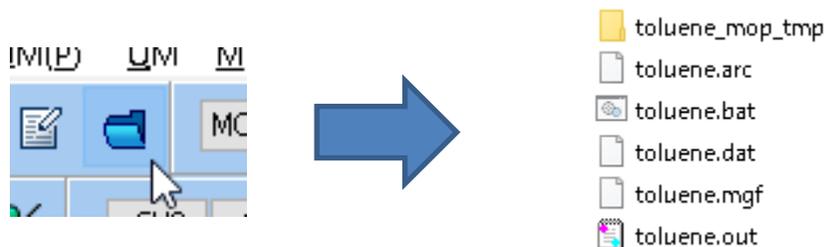
- [新規ジョブを開始する前に入力ファイルを保存してください]というダイアログが出現します。
[ファイル名]に「toluene」と入力し[保存]ボタンを押すと、winmos10¥UserDataの下にtoluene.datというファイルが作成され、続けてWinmostarがtoluene.datを入力ファイルとしてMOPACを起動します。



注：MOPAC, CNDO/S以外のソルバの場合は、Winmostar Job Managerが起動し、Winmostar Job Manager経由でソルバが起動します。

例題：トルエン分子のMO計算（ソルバの実行）

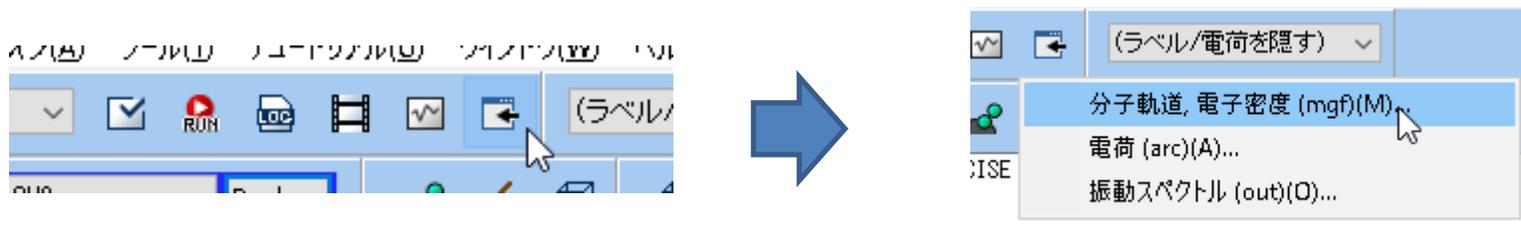
- 生成されたファイルを確認するためにメインウィンドウ上部の[フォルダを開く]ボタンを押し、現在開かれているファイルが置かれたフォルダを表示します。



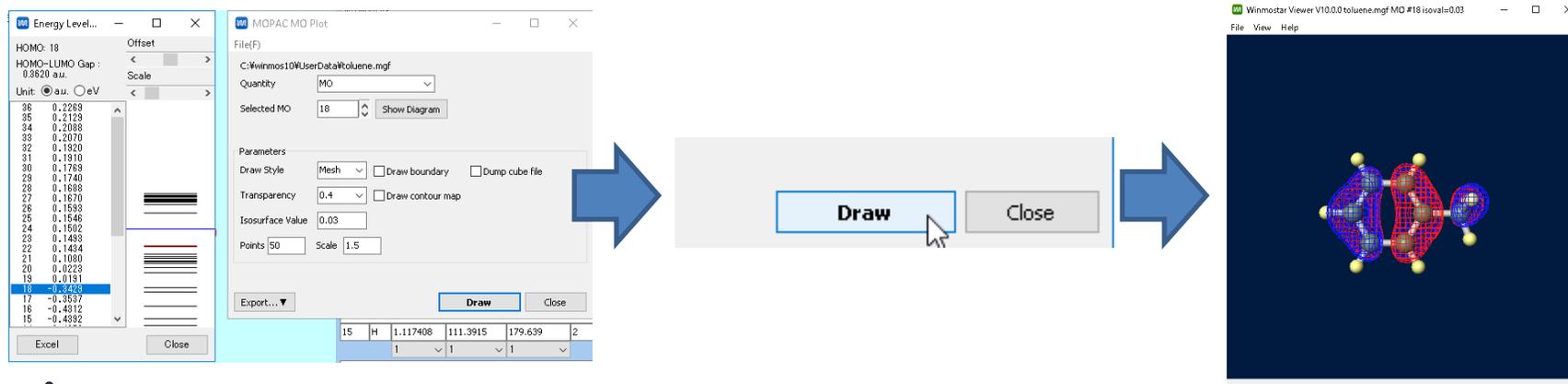
- Winmostarでは、ソルバを実行して生成する各種出力ファイルが
（入力ファイル名の拡張子を除いた文字列）.out
（入力ファイル名の拡張子を除いた文字列）.arc ...
という具合に命名されます。拡張子はソルバにより異なります。
- 同様に、複数の出力ファイル（場合によっては入力ファイルも）が収められた
（入力ファイル名の拡張子を除いた文字列）_mop_tmp¥
という名前のフォルダも生成されます。フォルダ名の接尾辞はソルバにより異なります。

例題：トルエン分子のMO計算（計算結果の可視化）

- MOPACが出力したファイルの可視化を行います。
- メインウィンドウ上部の[結果解析]ボタンを押し[分子軌道、電子密度 (mgf)]を選択すると[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ファイルが選択されるので、そのまま[開く]ボタンを押します。 (toluene.mgf)

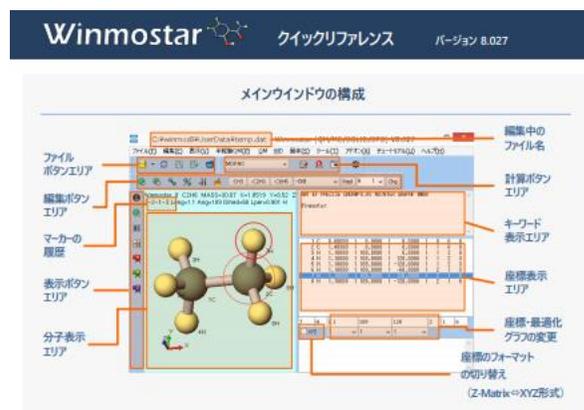


- Energy Level DiagramウィンドウとMOPAC MO Plotウィンドウが開きます。MOPAC MO Plotウィンドウの[Draw]ボタンを押すとWinmostar Viewerが起動しHOMOの分子軌道が出現します。



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/> ページの中から、まず最初に使用したいソルバの基礎編チュートリアルをトレースし、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