Winmostar ふう ビギナーズガイド



2018年10月5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 <u>https://winmostar.com/jp/qa_jp.php</u> をご確認ください。

Structure n	TINDOS nodeler and visualizer for fro	tar ee Chemistry simulations				
ホーム	機能表・新機能	ダウンロード	価格	ユーザガイド	講習会	よくある質問
<mark>♀</mark> ♀ 購入	質問一覧					
1. 代金の	の支払方法を教えてください。					
2. 当社九	いらどんな書類が発行されるた	教えてください。				
3 代理の	をすっ ディー・ ドラ 一千 いんかぶたく	7まス古法を数ラアくだち	1.1			





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エア(ソルバと呼ぶ)に対し、 グラフィカルユーザインターフェース(GUI)を提供します。



						- 0	×
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 <u>TIME LEFT:</u>	3598.8 GRAD.:	2.758	HEAT:	38.93337	
CYCLE:	35 TIME:	.03 \		138	HEAT:	38.92474	\sim
			ノンーノ	レ			
				-			





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™のダウンロードとインストール

・ ダウンロード <u>https://winmostar.com/jp/download_jp.html</u>

に移動し、ページ上部にある最新バージョンのWinmostar™のインストーラを入手します。

- 下図はバージョン8.024の例ですが、現時点で最新のものをダウンロードします。

バージョン	リリース	インストーラ	備考	
8.024 更新履歴	2018/7/10	winmostar0_setup_8.024.exe	最新バージョン	winmostar0_set up_8.024.exe

- ・ 続けて**ダウンロード**ページ中部にある**インストール方法**の指示に従ってインストールします。
 - Winmostar™だけではなく、各種ソルバもここに記載の方法でインストールします。



Winmostar™のファイル構成

111

Winmostar 🔆

- 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) ٠
 - (Winmostar) winmostar.exe : Winmostar™本体のアプリケーション : ローカルジョブを管理するアプリケーション(Winmostar Job Manager) winmosjm.exe winmosgl.exe : 分子軌道などを表示するアプリケーション (Winmostar 3D) UserPref¥ : Winmostarのユーザ設定を収めたフォルダ :各種シミュレーション用ファイルのデフォルトの保存先となるフォルダ UserData¥ samples¥

:サンプルデータを収めたフォルダ

.....

PC F Windows (C:) F Windows					
名前	種類	サイズ			
🎆 winmosgl. exe	アプリケーション	4,238 KB			
🎆 winmosjm. exe	アプリケーション	3,604 KB			
😻 winmostar.exe 📐	アプリケーション	13,252 KB			
🚳 glut64.dll لم	アプリケーション拡張	286 KB			
퉬 UserPref	ファイル フォルダー				
퉬 UserData	ファイル フォルダー				
🛄 Drocote	ファイル・フォルガニ				





Winmostar™を使う前に

- Winmostarは、同名で異なる拡張子のファイル(例えばmethane.datとmethane.logなど) を多数生成するため、エクスプローラ上で拡張子を表示することを推奨します。
 - Windows 7での設定方法:
 - Iクスプローラを開く→Altキーを押す→[ツール]→[フォルダーオプション]→[表示]
 →[登録されている拡張子は表示しない]のチェックが外れた状態にする
 - Windows 8、10での設定方法:
 - ・ エクスプローラを開く→[表示]→[ファイル名拡張子]のチェックが付いた状態にする







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インドウが開きます。
- ・ 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。





Winmostarの基本的な処理の流れ



9



例題:スチレン分子のMO計算

- 最初の例題として、孤立したスチレ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。
 - スチレン分子の電子状態を計算し、得られた結果のうちHOMO準位の分子軌道を可視化します。







例題:スチレン分子のMO計算(モデリング)

- ・ まずスチレン分子の構造を作成します(モデリングと呼ぶ)。
- メインウイ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。

1	ファイル(F) 編集(E) 表示(V)	半経験OM(P) C	警告
	新規(N)	Ctrl+N	変更を保存しますか?
	開<(<u>o)</u> ¹ ~	Ctrl+0	
	最近使ったファイル(<u>R</u>)	▶ 21	はい(Y) いいえ(N)

• メインウインドウが初期状態に戻ります。



キャンセル





例題:スチレン分子の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) ٠ に置換していくことでスチレン分子をモデリングします。



注:本チュートリアル通りに操作した場合は、自動で置換したい原子にマーカーが移動するので 原子の選択は省略できる

例題:スチレン分子の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。 ٠
- メインウインドウ上部の「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 ٠ [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ウイ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、 ٠ ここではデフォルトの設定を使うので何も変更せずウインドウ左下の[Set]ボタンを押します。



注:本チュートリアル通りに操作した場合は、あらかじめキーワード表示エリアにMOPACの 構造最適化のキーワードが表示されているので、キーワード設定の手順を省略できる

例題:スチレン分子のMO計算(ソルバの実行)

- ファイルを保存し、ローカルジョブとしてソルバを起動(実行)します。
- メインウインドウ上部の[計算実行]ボタンをクリックすると、「変更を保存しますか?」と 聞かれるので、[はい]をクリックすると[名前を付けて保存]ダイアログが開きます。

警告
変更を保存しますか?

 [名前を付けて保存]ダイアログで[ファイル名]に「styrene」と入力し[保存]ボタンを押すと、 winmos8¥UserDataの下にstyrene.datというファイルが作成され、続けてWinmostarが styrene.datを入力ファイルとしてMOPACを起動します。

<u>80</u>		名前を付けて	保存		×
۲) ۲ 🗧 🛞	📙 « winmos8 🕨 UserData 🕨	~ C	UserDataの検索	م
	ファイル名(N)	styrene			~
7	ァイルの種類(<u>工</u>)	MOPAC Input File (*.dat,*.mop)			~
ر ی	フォルダーの参照(<u>B)</u>		保存(<u>S</u>)	キャンセル







ファイル名に関する注意

- Winmostarから何かしらのファイルを保存する際に、そのファイルと、そのファイルが置かれる フォルダ(上位階層全て含む)の名前に、<u>半角英数以外が含まれる</u>と、Winmostarから呼び出さ れる一部の外部プログラムにおいてまれに処理に失敗する場合があります。
 - 問題がないケース:
 - C:¥winmos8¥UserData¥methane.dat
 - D:¥MyDocument¥methane_2.dat (アンダースコアは可)
 - 推奨されないケース:
 - C:¥winmos8¥UserData¥METHANE.dat (全角文字は非推奨)
 - C:¥winmos8¥UserData¥メタン.dat (日本語は非推奨)
 - C:¥winmos8¥UserData¥methane 2.dat
 - C:¥Users¥sato¥データ¥methane.dat (フォルダ名が非推奨文字)
 - C:¥Users¥佐藤¥methane.dat (ユーザ名が日本語のためフォルダ名が非推奨文字)

(スペースは非推奨)



例題:スチレン分子のMO計算(ソルバの実行)

- ソルバの実行中(今回の計算では1秒もかからない)はプロンプトウインドウが出現します。
- MOPACの場合のみ、ソルバの実行直後に自動で以下の様に動作します。
 - 処理のログ(styrene.out)がテキストファイルで開かれます。
 - 計算で得られた分子構造が書かれてたファイル(styrene.arc)がメインウインドウで 開かれます。
- 計算の終了後は、ログファイル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。



例題:スチレン分子の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インドウ上部の[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。

	퉬 styrene_temp	ファイル フォルダー	
	🖺 styrene.arc	ARC ファイル	3 KB
P 🔁 🖸	🖺 styrene.dat	DAT ファイル	1 KB
	📄 styrene.mgf	MGF ファイル	39 KB
	🖺 styrene.out	OUT ファイル	12 KB

• Winmostarでは、ソルバを実行して生成する各種出力ファイルか

(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 ...

といった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)_temp¥

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:スチレン分子の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。
- ・ メインウインドウ上部の[インポート]ボタンを押し[MO(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、メインウインドウで開かれているファイルにひも付けられた
 ファイルが選択されるので、そのまま[関く]ボタンを押します。 (styrong mgf)

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。 (styrene.mgf)

/	<u>ノでし」T</u>	06	<u>7</u> 0 (.	SLYLCHE	
) 固体(<u>5</u>)	ツール(<u>1</u>)	가지가(<u>A</u>)	チュートリ <i>ノ</i> ル(<u>し</u>)	$\sim \iota$
	 Image: Image: Ima	RN 📑	\$		
	H5 -C2H3		MO(mgf)	\ \	
	(- 0.0E04, 7	-0.5	Charge, Dipo	le(arc)	E MC
	=-0.9584 Z	.=0.3	Animation(a	rcì	p NC

 Energy Level DiagramウインドウとMopac MO Plotウインドウが開きます。Mopac MO Plot ウインドウ左下の[3D]ボタンを押すとWinmostar 3D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

 ユーザガイド <u>https://winmostar.com/jp/manual_jp.html</u> ページ中部のチュートリアル 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。

チュートリアル	Winmostar - クイックリファレンス バージョン 8027
動画チュートリアル	メインウインドウの構成
YouTube Flash	
分子モデリング	ConservationUnderstations data The Second Secon
有機分子 超分子 金属錯体	
結晶ビルダ	MiRAN 97 - Cartiller Age/Dimension Querker in Prefer
基本操作 表面切り出し 真空屑挿入	
リモートジョブ(各ソルバ共通)	表示パタン の
リモートジョプ NEW	
MOPAC	ゲナキシホージン クランの変更 エリア 虚構のフォーマット
<mark>基礎編 NEW</mark> (インディゴ分子, SMILES入力, 分子軌道)	uovorma. (Z≯Matrixe⇔X7Z∰s#)

- 詳細はユーザガイド上部のユーザーマニュアル、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 <u>https://winmostar.com/jp/qa_jp.php</u> をご確認ください。



以上