



Engli:

[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](#) [サポート](#)

[V7以前の旧バージョンをお使いの方はこちら](#)

マニュアル

[ビギナーズガイド](#) **NEW**

[Winmostar本体および各種ソルバのインストール方法](#)

[ユーザーマニュアル](#)

[リモートジョブ投入に関する補足資料](#)

[リモートジョブ投入チュートリアル \(共通\)](#) **UPDATE**

[Gaussianのリモートジョブ投入マニュアル](#) [PBSの場合](#) [SGEの場合](#) [TSUBAME3.0の場合](#)

[TSUBAME3.0のSSHアクセス数制限について](#) **NEW**

[FOCUSへのPuTTYを用いた多段SSH接続によるリモートジョブ投入手順](#)

チュートリアル

[動画チュートリアル](#)

[YouTube](#) [Flash](#)

[分子モデリング](#)

[有機分子](#) [超分子](#) [金属錯体](#)

[結晶ビルダ](#)

[基本操作](#) [表面切り出し](#) [真空層挿入](#)

[リモートジョブ \(各ソルバ共通\)](#)

[リモートジョブ](#) **NEW**

[MOPAC](#)

[基礎編](#) **NEW**

(インディゴ分子, SMILES入力, 分子軌道)

[MEP・IRC計算](#) **NEW**

(クロロエタン, 化学反応解析, SN2反応, 気相反応, Minimum Energy Path, Intrinsic Reaction Coordinate, 遷移状態探索)

[CNDO/S](#)

[基礎編](#) **NEW**

(インディゴ分子, SMILES入力, UV-Visスペクトル)

[GAMESS/Gaussian](#)

[基礎編](#) **NEW**

(スチレン分子, 構造最適化, IR, ラマン, NMR, UV-Vis, 分子軌道, 静電ポテンシャル)

[NWChem](#)

[基礎編](#) **NEW**

(スチレン分子, 構造最適化, IR, ラマン, NMR, UV-Vis, 分子軌道, 静電ポテンシャル)

NEB法

(クロロエタン, 化学反応解析, SN2反応, 気相反応, Nudged Elastic Band, 遷移状態探索)

Gromacs**シミュレーションセルの作成**

(RESP電荷, AM1-BCC電荷, 固液界面, タンパク-リガンド系)

基礎編

(水, 液体, 各種熱力学量, アニメーション, 動径分布関数, 平均二乗変位, 自己拡散係数)

タンパク系

(リゾチーム, PDB, 水素付加, 溶媒配置, イオン追加, 分子の固定, RMSD)

蒸気圧・表面張力

(水, 気液界面, 相平衡, 表面張力, 蒸気圧, 密度分布)

界面張力

(水, ベンゼン, 液液界面, 界面張力, 相平衡, AM1-BCC電荷, 密度分布, 界面ビルダ)

誘電率・粘度

(水, 液体, 誘電率, 粘度, 温度・密度の自動スケーリング)

溶解度/ χ /DPDパラメータ

(水, ベンゼン, Hildebrandの溶解度パラメータ, SP値, χ パラメータ, DPD a_{ij} パラメータ, 凝集エネルギー, AM1-BCC電荷)

溶媒和自由エネルギー(ER法)

(エタノール, AM1-BCC電荷, 水和, 希釈溶液, エネルギー表示法, ERmod)

溶媒和自由エネルギー(BAR法)

(エタノール, AM1-BCC電荷, 水和, 希釈溶液, Bennett Acceptance Ratio法)

LAMMPS**シミュレーションセルの作成**

(RESP電荷, AM1-BCC電荷, 固液界面, タンパク-リガンド系)

基礎編

(水, 液体, 各種熱力学量, アニメーション, 動径分布関数, 平均二乗変位, 自己拡散係数)

固体壁を含む系

(グラフェン, 水, 界面ビルダ, 不均一核生成, 固液界面系, 固体壁の固定, 吸着)

熱伝導率

(水, 液体, 熱伝導率, 温度・密度の自動スケーリング, 自己相関関数, Green-Kubo式)

融点計算

(シリコン, 界面ビルダ, Tersoff, 固液界面系, 相平衡, 融点, NPH一定計算)

ガラス転移温度(ポリマー)

(ポリプロピレン, ポリマーメルト, AM1-BCC電荷, ポリマービルダ, アニール計算, 比体積, ガラス転移温度, T_g)

伸長計算(ポリマー)

(ポリエチレン, ポリマーメルト, AM1-BCC電荷, ポリマービルダ, 破壊, ひずみ-応力曲線, SS曲線)

線膨張率(固体)

(シリコン, 結晶ビルダ, Tersoff, アニール計算, 線膨張率)

伸長計算(固体)

(アルミ, 結晶ビルダ, EAM, スーパーセル, 欠陥, ひずみ-応力曲線, SS曲線)

散逸粒子動力学

(ジブロックコポリマー, DPD, モルフォロジ, 散乱関数, ラメラ構造)

Amber**基礎編**

(シニョリン, 溶媒配置, PDB, 各種熱力学量, アニメーション)

Quantum ESPRESSO**基礎編**

(シリコン, SCF計算, バンド構造, 状態密度, 部分状態密度, 電子密度)

構造最適化

(ルチル型酸化チタン, 構造最適化, アニメーション)

Car-Parrinello MD

(メタン分子, Γ 点, CPMD, アニメーション, エネルギー, 温度制御)

Born-Oppenheimer MD **NEW**

(メタン分子, Γ 点, BOMD, アニメーション, エネルギー, 温度制御)

仕事関数

(金, スラブモデル, 結晶ビルダ, SCF計算, 仕事関数, ポテンシャル分布, ESM法)

ESM法

(アルミ, スラブモデル, 結晶ビルダ, SCF計算, constant-N計算, constant-mu計算, フェルミエネルギー)

フォノン計算

(シリコン, SCF計算, フォノン計算, ph.x, IR, Raman, 誘電率, 振動, フォノンバンド, フォノン状態密度)

誘電関数

(シリコン, SCF計算, 誘電関数, epsilon.x)

フェルミ面

(銅, FCC, SCF計算, フェルミ面, FermiSurfer)

スピン分極計算

(鉄, BCC, SCF計算, スピン分極計算, Up/downスピン, バンド構造, 状態密度, 部分状態密度, 強磁性体)

NEB法 **NEW**

(銅, スラブモデル, 表面吸着モデル, 部分構造を固定した構造最適化計算, NEB, 遷移状態, 表面拡散)

OpenMX

基礎編 **NEW**

(ダイヤモンド, SCF計算, バンド構造, 状態密度, 部分状態密度, 電子密度)

FDMNES

XAFSスペクトル

(銅, FCC, XAFSスペクトル, XANESスペクトル)

BoltzTraP

基礎編 **NEW**

(Mg_2Si , FCC, Quantum ESPRESSO, ゼーベック係数, 電気伝導率, 電子熱伝導率)

DC-DFTB

構造最適化

(スチレン分子, 構造最適化, アニメーション)

Fragment ER

結合自由エネルギー計算

(NAMD, リゾチーム, PDB, タンパク-リガンド系, エネルギー表示法)

etc その他

Fireflyのマルチスレッド・並列実行の方法

ラマンスペクトルの計算方法 (関連ファイル)

大分子対応版MOPAC6の実行バイナリ

注：動作未保障、最大420原子、重原子/軽原子200/220,150/170,100/120)

PIO解析機能の使用方法

概要 **Gaussian向け** **GAMESS向け** **処理フロー** **PIO研究会HP** (現在、研究会としての活動は終了しています)

↔ 関連リンク

各ソルバの公式HP

[OpenMOPAC](#) [GAMESS](#) [Firefly](#) [NWChem](#) [SMASH](#) [Gromacs](#) [LAMMPS](#) [Amber](#) [MODYLAS](#) [Quantum ESPRESSO](#) [OpenMX](#) [FDMNES](#)

基底関数・古典力場・擬ポテンシャルファイルの入手先

[EMSL Basis Set Exchange](#) (GAMESS, Gaussian, NWChem用基底関数データベース)

[NIST Interatomic Potentials Repository](#) (LAMMPS用無機物ポテンシャル)

[GBRV Ultrasoft/PAW Pseudopotentials](#) (Quantum ESPRESSO用擬ポテンシャル)

外部サイトのWinmostarに関する情報

木原寛, [Winmostarに関する情報](#)

貞富博喬, 木原寛, [Winmostarを用いた計算化学実験](#)

関連書籍

Winmostarが使用されている文献

[三共出版『フロンティアオービタルによる新有機化学教程』](#)

[講談社『よくある質問 立体化学入門』](#) [Winmostarを用いた解答・補足説明へのリンク](#)

各種計算手法の入門者向けの文献

[講談社『すぐできる 量子化学計算ビギナーズマニュアル』](#) (GAMESSに関してはこの版がお勧めです)

[講談社『新版 すぐできる 量子化学計算ビギナーズマニュアル』](#)

[KS化学専門書『すぐできる分子シミュレーションビギナーズマニュアル』](#)

[吉岡書店『密度汎関数理論入門: 理論とその応用』](#)

株式会社クロスアビリティ <http://x-ability.co.jp/>

〒113-0033東京都文京区本郷4-1-5 石渡ビル3階 [特定商取引法に関する法律に基づく記載](#)

Copyright 2008-2018 X-Ability Co., Ltd. All Rights Reserved.