



English

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/ $\chi$ /DPDパラメータ**

(水, ベンゼン, Hildebrandの溶解度パラメータ, SP値,  $\chi$ パラメータ, DPD aij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, 希釀溶液, 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, 希釀溶液, 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, 热伝導率, 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, アニーリング計算, 比体積, ガラス転移温度, Tg)

**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, アニーリング計算, 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**

(シニヨリン, 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, 「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, 「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)

**スピニ分極計算**

(鉄, BCC, SCF計算, スピニ分極計算, Up/downスピニ, 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**

(ダイアモンド, 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<sub>2</sub>Si, 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)

 **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)

## leftrightarrow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.