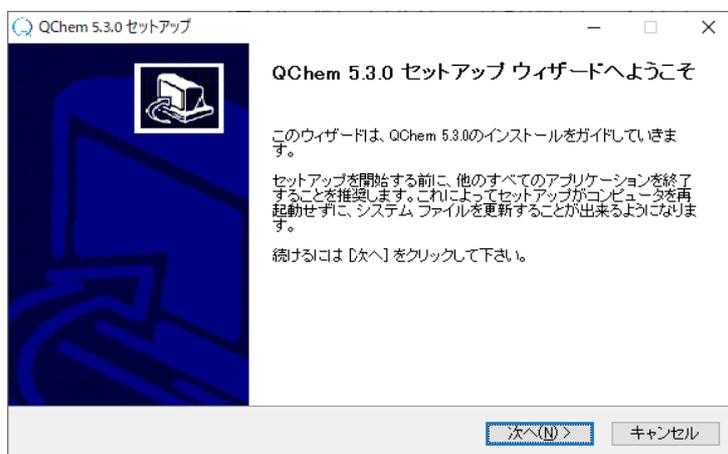


【Q-Chem のインストール】 — Windows OS へのインストール —

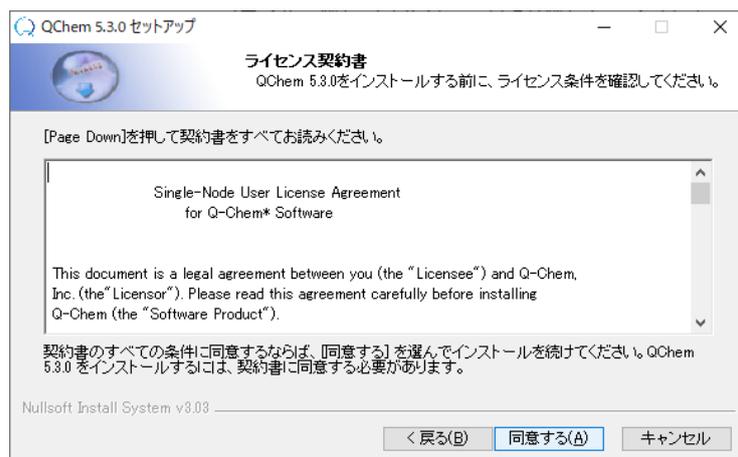
(株) アフィニティサイエンス

概要：Windows OS へのインストールについて、その手順を説明していきます。

1. Windows 専用の Q-Chem インストーラーをダウンロードし、実行してください。



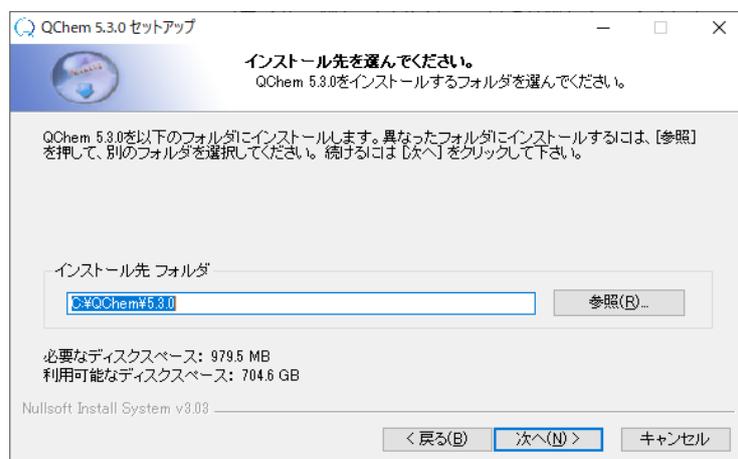
2. ライセンス契約書を確認して同意します。



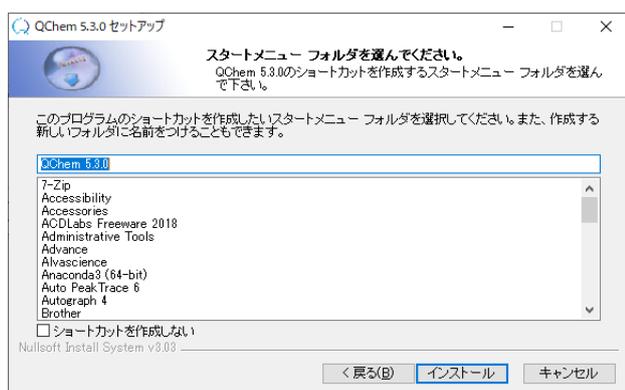
3. デフォルトのインストールディレクトリは、

C:\QChem\バージョン名)

に設定されています。インストールディレクトリを変更する場合は、希望する場所に変更してください。



4. インストールを開始します。



5. スタートメニューから、QChem (バージョン名) → Register Q-Chem を実行します。

プロンプト画面が表示されるので、Parallel(p)もしくは Serial(s)ライセンスを選択し、order number を入力してください。

```

C:\> Register Q-Chem
hostname = [redacted] machine ID data
sid = 6024E84CB/
Which Q-Chem license would you request?
Please enter 'P' for Parallel, 'S' for Serial
P
Please provide your Q-Chem Order Number Below:
- The order number is usually on the CD cover/insert or in the email
  you received from Q-Chem.
- If you are a new Q-Chem user without order number please enter 0
  below and provide the registration information subsequently.
Your order number is:
#### 注文番号

Your license.dat file C:\QChem\5.3.0\license.data has been generated
Please check the information in that file and make sure it is correct
You need to email this file to license@q-chem.com to obtain your license keys.

C:\QChem\5.3.0>
    
```

6. 生成されたライセンスファイル (license.data) を、

電子メールで、当社サポート係 (help@affinity-science.com) または Q-chem 社 (license@q-chem.com)宛に送り、送付データに対応する認証用ライセンスファイルの発行申請を行ってください。

7. 通常、一両日程度で認証用ライセンスファイルが電子メールで届きます。

こちらのライセンスファイルには、最後に ".hostname" が付いています。

例. qchem.license.dat.(hostname)



".hostname"の部分を取り除き (リネーム)、こちらを Q-Chem のインストールディレクトリ以下にある `\Qcaux\license\`内に保存してください。

例. C:\QChem\5.3.0\license\qchem.license.dat

Q-Chem Windows OS へのインストール



8. サンプル用入力ファイルを用いてプログラムが正常に動作するか確認してください。

スタートメニューから、QChem (バージョン名) → Q-Chem Shell を実行します。



9. Q-Chem Shell が起動したら、以下のコマンドを実行してください。

```
$ qchem dft_b3lyp_h2o.in
```

Q-Chem Windows OS へのインストール

```

Q-Chem Shell
Q-Chem Version 5.3.0

=== Q-Chem environment variables ===
QC = C:\QChem\5.3.0
QCAUX = C:\QChem\5.3.0\qcaux
QCSRATCH = C:\Users\egghead\AppData\Local\Temp

To test Q-Chem, type 'qchem dft_b3lyp_h2o.in dft_b3lyp_h2o.out'
C:\QChem\5.3.0>qchem dft_b3lyp_h2o.in

Running Q-Chem job 1 of 1
"C:\QChem\5.3.0\exe\qcprow.exe "C:\Users\egghead\AppData\Local\Temp\qchem5790\qcinp_5790.in_0 "C:\Users\egghead\AppData\Local\Temp\qchem5790\
Welcome to Q-Chem
A Quantum Leap Into The Future Of Chemistry

Q-Chem 5.3, Q-Chem, Inc., Pleasanton, CA (2020)

Yihan Shao, Zhengting Gan, E. Epifanovsky, A. T. B. Gilbert, M. Wormit,
J. Kussmann, A. W. Lange, A. Behn, Jia Deng, Xintian Feng, D. Ghosh,
M. Goldey, P. R. Horn, L. D. Jacobson, I. Kaliman, T. Kus, A. Landau,
Jie Liu, E. I. Proynov, R. M. Richard, R. P. Steele, E. J. Sundstrom,
H. L. Woodcock III, P. M. Zimmerman, D. Zuev, B. Alam, B. Albrecht,
A. Aldossary, E. Alguire, S. A. Baeppler, D. Barton, Z. Benda,
Y. A. Bernard, E. J. Berquist, K. B. Bravaya, H. Burton, K. Carter-Fenk,
D. Casanova, Chun-Min Chang, Yuning Chen, A. Chien, K. D. Closser,
M. P. Coons, S. Coriani, S. Dasgupta, A. L. Dempwolff, M. Diefenbach,

```

プログラムが実行され、実行の所要時間が表示されたらテストは終了です。

```

Q-Chem Shell
1 A1 2 A1 1 B1 3 A1 1 B2
-- Virtual --
0.069 0.156 0.790 0.876 0.891 0.897 1.073 1.191
4 A1 2 B1 3 B1 5 A1 2 B2 6 A1 4 B1 7 A1
1.730 1.740 1.779 2.308 2.617 3.566
8 A1 1 A2 3 B2 9 A1 5 B1 10 A1
-----
Ground-State Mulliken Net Atomic Charges

Atom Charge (a.u.)
-----
1 O -0.781752
2 H 0.390876
3 H 0.390876
-----
Sum of atomic charges = 0.000000
-----
Cartesian Multipole Moments

Charge (ESU x 10^10)
-0.0000
Dipole Moment (Debye)
X 0.0000 Y -0.0000 Z -2.0591
Tot 2.0591
Quadrupole Moments (Debye-Ang)
XX -4.2355 XY 0.0000 YY -7.1602
XZ -0.0000 YZ 0.0000 ZZ -6.0262
Octopole Moments (Debye-Ang^2)
XXX 0.0000 XXY -0.0000 XYY 0.0000
YYY 0.0000 XXZ -1.1736 XYZ -0.0000
YYZ -0.3347 XZZ 0.0000 YZZ 0.0000
ZZZ -1.2139
Hexadecapole Moments (Debye-Ang^3)
XXXX -5.8166 XXXY -0.0000 XXXY -2.0619
XYYY -0.0000 YYYY -5.1640 XXXZ -0.0000
XXYZ 0.0000 XYYZ -0.0000 YYYZ -0.0000
XXZZ -1.7138 XYZZ -0.0000 YYZZ -1.9223
XZZZ -0.0000 YZZZ -0.0000 ZZZZ -6.1153
-----
Archival summary:
1#1# #SP#ProcedureUnspecified#6-31G*#12#FriJul3110:05:392020FriJul3110:05:392020#0##,ProcedureUnspecified
,6-31G*,#0,1#0#H,1,0.947#H,1,0.947,2.105,5##@

Total job time: 8.35s(wall), 0.78s(cpu)
Fri Jul 31 10:05:39 2020

*****
* Thank you very much for using Q-Chem. Have a nice day. *
*
*****

```