2020年7月31日

【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。

() QChem 5.3.0 セットアップ			_	_		×
	インストール先を む QChem 5.3.0をイン	産んでください。 ルストールするフォルタ	ずを選んでく	ださい。		
QChem 5.3.0を以下のフォル を押して 20のフォルガを選	ダにインストールします 畑 マイドオレン 待ける	「。異なったフォルダに ロナ Fをへ 1 をクレック	:インストー) ルマティン	しするにに	t、[参照]	
2140 し、かいフォルンで度	111011/201617701701	1018 DAY 11 20090	UC POW	0		
- インストール先 フォルダー						
O:¥QChem¥5.3.0				参照(<u>R</u>)	·	
必要なディスクスペース: 9 利用可能なディフクフィース	79.5 MB					
Nullsoft Install System v3.03 -	<. 704.0 GB					
		< 戻る(<u>B</u>)	次へ(<u>N</u>)ン	>	キャンセル	V

4. インストールを開始します。

(_) QChem 5.3.0 セットアップ	– 🗆 X	() QChem 5.3.0 セットアップ	- 0 ×
Control <	ルダを選んでください。 カットを作成するスタートメニュー フォルダを選ん		ンストールしています。しばろくお待ちください。
このプログラムのショートカット本作成したいスタートス二 新しいフォルジレン石制をつけることもできます。	ュー フォルダを選択してください。また、作成する ^ 、	拍出:qoproglexe 88%	
□ ショートカットを作成しない Nulisoft Install System v3.03	< 戻る(B) インストール キャンセル	Nullsoft Install System v3.03	〈戻る(1)) 次へ(1) 〉 キャンセル
	 QChem 5.3.0 セットアップ QChem 5.3. ました。 OChem 5.3.ました。 OChem 5.3.ました。 OChem 5.3.ました。 ロイザードを閉じる 	ー ロ × 0 セットアップ ウィザードは完了し このコンビュータにインストールされました。 るいは 院で] を押してください。	
		< 戻る(B) 完了(E) キャンセル	

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 **Selial(s)**ライセンスを選択し、order number を入 力してください。 Q-Chem Windows OS へのインストール

Register Q-Chem
hostname =machine ID data sid = 6024E84UB7 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 nubmer 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(<u>help@affinity-science.com</u>) または Q-chem 社(<u>license@q-chem.com</u>) 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)

🖊 🕑 📙 🖛 ダウンロー	4			- 0	×
ファイル ホーム 共有	表示				~ 🕐
← → ~ ↑ ↓ > P	C > Windows (C:) > ユーザー > egghead > ダウ	シロード		✓ ひ ダウンロードの検索	
▲ カイック アクセフ	名前	更新日時	種類 サイズ		
デスクトップ 🖈	◇今日 (1)				
 ダウンロード * 	🗋 qchem.license.dat.	2020/07/31 10:09	DESKTOP-B3981P 1 KB		
F+1X7F *	~昨日 (1)				
📰 ピクチャ 🛛 🖈	ᢙ qchem-5.3.0-installer.exe	2020/07/30 14:28	アプリケーション 145,363 KB		
nmr_RT2019					

".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¥(バージョン名)¥qcaux¥license¥qchem.license.dat

Q-Chem Windows OS へのインストール

 □ □<th>表示</th><th></th><th></th><th></th><th>_</th><th>× ~ ?</th>	表示				_	× ~ ?
← → ~ ↑ 🔒 → PC	> Windows (C:) > QChem > 5.3.0 > qcaux	> license			✓ ⁰ ○ ○ ○ ○ ○ ○ ○ ○ ○ ○	
▲ カイック アクセス	へ 名前	更新日時	種類	サイズ		
= 7775v7	dchem.license.dat	2020/07/31 10:03	DAT ファイル	1 KB		
■ ジメリーン ★ ダウンロード ★ 留 ドキュメント ★						

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) \rightarrow 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

Chem Shell	-		\times
Q-Chem Version 5.3.0			^
=== 0-Chem environment variables === QC = C:¥0Chem¥5.3.0 QCAUX = C:¥0Chem¥5.3.0¥qcaux QCSCRATCH = C:¥Users¥egghead¥AppData¥Local¥Temp			
To test Q-Chem, type 'achem dft_b3lyp_h2o.in dft_b3lyp_h2o.out'			
C:¥QChem¥5.3.0>qchem dft_b31yp_h2o.in			
Running Q-Chem job 1 of 1 "C:¥QChem¥5.3.0"¥exe¥qcprog.exe "C:¥Users¥egghead¥AppData¥Local¥Temp"¥qchem5790¥qcinp_5790.in_0"C:¥Users¥ a¥Local¥Temp"¥qchem5790/ Welcome to Q-Chem A Quantum Leap Into The Future Of Chemistry	egghe	ad¥App[Dat
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, Yunging Chen, A. Chien, K. D. Closser, M. P. Coors, S. Coriani, S. Dasgupta, A. L. Dempwolff, M. Diedenhofen,			~

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 Virtual 0.063 0.156 0.790 4 A1 2 B1 3 B1 1.730 1.740 1.779 8 A1 1 A2 3 B2	3 A1 1 B2 0.876 0.891 0 5 A1 2 B2 6 2.308 2.617 3 9 A1 5 B1 10	.897 1.073 A1 4 B1 566 A1	1.191 7 A1	^			
Ground-State	Mulliken Net Atomic	Charges					
Atom	Charge (a.u.)						
1 0 2 H 3 H	-0.781752 0.390876 0.390876						
Sum of atomic charges	= 0.000000						
Car	tesian Multipole Mom	ents					
Charge (ESU x 10^10 -0.0000 Dipole Moment (Deby X 0.0000 Tot 2.0591 Quadrupole Moments XX -4.2355 XZ -0.0000 Octopole Moments (D XXX 0.0000 YYY 0.0000 YYZ -0.3347 ZZZ -1.2139 Hexadecapole Moment XXXX -5.8166 XYYY -0.0000 XXYZ 0.0000 XXYZ 0.0000 XXZZ -1.7138 XZZZ -0.0000) e) Y -0.0000 YZ 0.0000 YZ 0.0000 ebye-Ang^2) XXY -0.0000 XZ -1.1736 XZZ 0.0000 s (Debye-Ang^3) XXY -0.0000 YYYY -5.1640 XYZZ -0.0000 YYZZ -0.0000 YZZZ -0.0000	Z YY ZZ XYY YZZ XXYY YZZ XXYY YZZ YYZZ ZZZZ	-2.0591 -7.1602 -6.0262 0.0000 -0.0000 -2.0619 -0.0000 -1.9223 -6.1153				
r-rchival summary: ¥1¥ ¥1¥ Hand And And And And And And And And And A							