

FAQ (分子科学)

(最終更新: 2025/10/7)

分子科学アプリに関するよくある質問集です。
利用に関する一般的な質問についてはこちら。

FAQ

- インストール済アプリを実行するには?
- Gaussianのchkファイルを可視化のために変換したいがformchkが無い
- formchk実行時にメモリ不足と思われるエラーで失敗する
- 利用申請/事前準備が必要なソフト(ORCA, GRRM23, Open OnDemand, Crystal, AlphaFold3)
- GUI アプリ(GaussView や VMD)を使いたい
- ソフトウェア導入の要望

インストール済アプリを実行するには?

RCCS で導入した分子科学系のアプリケーションについては、サンプルジョブを用意しています。サンプルをご自身のディレクトリにコピーして実行したり、サンプルを改変してご自身のインプットを作るなどしてご利用ください。通常、ジョブスクリプトは sample.sh のような名前で用意されており(少し違った名前になっている場合もあります)、jsub sample.sh のような形で投入できます。

サンプルファイルの場所は[パッケージプログラム一覧ページ](#)のリストに記載があります。サンプルの標準的な置き場、/apl/(アプリ名)/(バージョン)/samples に直接アクセスすることも可能です。

- 参考: [サンプルジョブの実行](#)

Gaussianのchkファイルを可視化のために変換したいがformchkが無い

以下のコマンドを実行してからformchkコマンドを実行してください。ログインシェルの種類により実行するコマンドが異なることに注意してください。

ログインシェルが bash, zsh の場合:

```
$ source /apl/gaussian/16c02/g16/bsd/g16.profile
```

ログインシェルが csh (tcsh) の場合:

```
$ source /apl/gaussian/16c02/g16/bsd/g16.login
```

(PYTHONPATH: Undefined variable. というメッセージが表示された場合も設定は読み込まれています。そのまま formchk を実行できます)他のバージョンの Gaussian や違うキューを用いた計算等の場合には適宜ディレクトリの場所を置き換えてください。また、上記設定の代わりに gaussian の module を load しても formchk コマンドは利用可能です。

formchk実行時にメモリ不足と思われるエラーで失敗する

メモリが足りない場合、formchk が以下のようなメッセージでエラー終了します。

```
Out-of-memory error in routine WrCIDn-* (IEnd= ***** MxCore= *****)
Use %mem=***MW to provide the minimum amount of memory required to complete this step.
Error termination via Lnk1e at (**date**).
```

formchk の使うメモリ量は GAUSS_MEMDEFで指定できますので、以下のように設定の上(値は適宜調整して下さい)、formchk を再度実行ください。

bash/zsh:

```
export GAUSS_MEMDEF=400MW
```

csh:

```
setenv GAUSS_MEMDEF 400MW
```

上記の例では 400MW (=3200MB) のメモリを指定しています。export GAUSS_MEMDEF=3200MB のようにバイト(Byte)単位でも指定できます。

利用申請/事前準備が必要なソフト(ORCA, GRRM23, Open OnDemand, Crystal, AlphaFold3)

ORCA, GRRM23, Open OnDemand, Crystal, AlphaFold3 は利用前に申請や準備が必要です。
以下のリンク先の内容をご確認ください。

- ORCA => [公式サイトへのユーザー登録と RCCS へのメール申請が必要です。](#)
- GRRM23 => [利用申請書の作成が必要です。](#)
- Open OnDemand => [このウェブサイトでパスワードの登録が必要です。](#)
- Crystal => [利用申請書の作成が必要です。\(ページ下部の注意書きをご確認ください\)](#)
- AlphaFold3 => [ご自身でパラメータを申請、ダウンロードする必要があります。](#)

GUI アプリ(GaussView や VMD)を使いたい

X11 転送や Open OnDemand を使うことで GUI の利用が可能です。[こちらの FAQ 項目の内容をご確認ください。](#)

アプリの実際の起動コマンドは[アプリリスト中](#)に記載されています(例: GaussView6 ならば gview6 コマンドで起動できます)。VMD などで X11 転送ではうまく動作しない場合でも Open OnDemand のデスクトップ環境では動作する可能性があります。

ソフトウェア導入の要望

下記の項目を全てご記入の上、[rccs-admin\[at\]ims.ac.jp](mailto:rccs-admin[at]ims.ac.jp)宛(迷惑メール対策のため、@を[at]に置換しています)に送信してください。有料ソフトウェアの場合、導入できないことがあります。

- 導入を希望するソフトウェアの名前、バージョン
- ソフトウェアの概要と特長
- 共同利用システムに導入を希望する必要性
- 開発元のURL

[View PDF](#)