

gsub (Open OnDemand)

Gaussian??????

Gaussian????????????????????

1. ?????: ?????????????????????
2. **Gaussian??**: ?????????????????????

????????????????????

データ準備

[こちらのページを参照してください。](#)

Gaussian設定

入力ファイル設定

? ??????

- 選択方法: 「参照」ボタンでファイルブラウザを使用、または直接パス入力
- プレビュー機能: ファイル選択後、内容が自動的にプレビュー表示

? ??????

- 統合エディタ: 「編集」ボタンをクリックして入力ファイルを直接編集
- 保存: 「保存」ボタンをクリック

📁 入力ファイル

Gaussian入力ファイル

~/ccood_job/test/

📁 参照

✎ 編集

Gaussianの入力ファイル (.comまたは.gjf) のパス

```
#p rb3lyp/3-21g force test scf=novaracc
```

```
Gaussian Test Job 397:
```

```
Valinomycin force
```

```
0,1
```

```
0,-1.3754834437,-2.5956821046,3.7664927822
```

```
0,-0.3728418073,-0.530460483,3.8840401686
```

test0397.com

```
1 #p rb3lyp/3-21g force test scf=novaracc
2
3 Gaussian Test Job 397:
4 Valinomycin force
5
6 0,1
7 O,-1.3754834437,-2.5956821046,3.7664927822
8 O,-0.3728418073,-0.530460483,3.8840401686
9 O,2.3301890394,0.5231526187,1.7996834334
10 O,0.2842272248,2.5136416005,-0.2483875854
11 O,2.3870396194,3.3084808604,0.2868546915
12 O,3.927241841,1.9677029583,-2.7261655162
13 O,2.2191878407,-1.0673859692,-2.8338343532
14 O,4.209257915,-1.2459024314,-3.1616013359
15 O,1.7622263124,-1.2194205092,-5.8516071343
16 O,1.8363626567,3.1095923678,-3.7084594295
17 O,0.2486786219,0.966590651,-3.8828785542
18 O,-2.5586288262,-0.0906355161,-1.9360823389
19 O,-0.3281133832,-2.3898727819,0.2344263336
```

キャンセル

保存

Gaussianバージョン選択

? ??????????

Gaussian 16, Gaussian 09

? G16????????

Gaussian 16選択時に以下のリビジョンから選択：

c02, c01, b01

 Gaussianバージョン

Gaussian 16

Gaussian 09

G16リビジョン

g16c02 (C.02)

▼

Gaussian 16のリビジョンを選択します。

計算リソース設定

? ジョブタイプ選択

標準計算

- 1-64、128コア

大容量メモリ計算

- 標準計算ではメモリ不足の時に使用
- 64コアまたは128コアのみ選択可能

GPU計算

- あまり速くならないため非推奨
- GPU1基あたり最大16コア。最大128コア。

? CPUコア数設定

- プリセット選択：1, 4, 8, 16, 32, 64, 128コア
- 手動入力：入力フィールドで任意のコア数を指定

? GPU設定（GPU計算選択時）：1-8?????

? 実行時間設定：????????????

? ストレージオプション

- スクラッチ領域として大容量の/gwork使用
- 速度は少し落ちる。

計算リソース設定

Job Type

標準計算

▼

標準的なGaussian計算

CPUコア数

1

4

8

16

32

64

128

8

1から64までの値、または128を選択できます

最大実行時間

72

0

0

時間

分

秒

☐ 大容量スクラッチ領域を使用

低速だが大容量のスクラッチ領域を使用します。大規模計算に適しています。

⚙️ 詳細設定

▼

詳細設定（オプション）

「詳細設定」をクリックして展開すると以下の設定が可能です：

? 通知設定：????????????

? ?????????????????????????????

? ジョブ名設定

- 任意のジョブ名を設定
- 空白の場合は入力ファイルから自動生成
(例：test0397.com → test0397)

☐ メール通知を送信

ジョブの開始時と終了時にメール通知を受け取ります

☐ 既存ファイルを上書き

同名のファイルが存在する場合に上書きします

ジョブ名 (任意)

未指定の場合は入力ファイル名から自重

ジョブの識別に使用する名前（省略可）

ジョブ投入

「ジョブを投入」ボタンをクリック

⚠️ ジョブ投入

以上の設定でGaussianジョブを投入します。よろしければ「ジョブを投入」ボタンをクリックしてください。

✔️ ジョブを投入