

Gaussianジョブの投入

Gaussianジョブ投入は以下の2つのステップで行います：

1. **データ準備**: 作業ディレクトリの設定、入力ファイルの準備
2. **Gaussian設定**: インプットの選択・編集、計算リソースの設定、投入

各ステップは画面上部のタブで切り替えることができます。

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

■ ファイル選択

- **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

■ ファイル編集

- **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 📄 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 0,-1.3754834437,-2.5956821046,3.7664927822
8 0,-0.3728418073,-0.530460483,3.8840401686
9 0,2.3301896394,0.5231526187,1.7996834334
10 0,0.2842272248,2.5136416085,-0.2483875854
11 0,2.3878930104,3.3084808084,0.2880549315
12 0,3.92224843,1.907782583,-2.7261625162
13 0,2.2191878407,-1.0673859692,-2.8338343532
14 0,4.209257915,-1.2459024314,-3.1616013359
15 0,1.7622263124,-1.2194285092,-5.8516071343
16 0,1.8363626507,3.1895923678,-3.7884594295
17 0,0.2486786229,0.3665906511,-3.8828785542
18 0,-2.5586288262,-0.8998355161,-1.9360823389
19 0,-0.3281138832,-2.3890727819,0.2344263336
```

キャンセル 保存

Gaussianバージョン選択

■ 利用可能バージョン

Gaussian 16, Gaussian 09

■ G16リビジョン選択

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基から設定

■ 実行時間設定：時間・分・秒で個別に設定

■ 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

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：開始・終了時にもメール通知

■ 既存ファイルの上書：同名のファイルが存在する場合の動作を設定

■ 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)

⚙️ 詳細設定



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は上書きします

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