

分子計算支援システム Winmostar の開発 (5)

千田範夫

出光興産 (株) 中央研究所、解析技術室(〒299-0293 千葉県袖ヶ浦市上泉 1280)

【緒言】

Winmostar は、分子のモデリングから分子軌道計算、計算結果の表示までを Windows 上で実現するソフトウェアである[1-4]。グラフィカルに分子を構築し、分子軌道法プログラムにデータを渡して計算を行わせ、出力(最適化構造/分子軌道)を可視化することができる。

【方法】

開発言語は Delphi を用いており、ランタイム等は不要な単体実行 exe となっている。インストールは単にファイルの解凍・コピーであり、レジストリへの書き込みを行わないので、MO や USB メモリーから実行することも可能である。

OS は Windows98, Me, NT, 2000, XP に対応し、Winmostar web site [5]で公開中。

【結果】

操作方法は単純で、直感的に操作できる。各種分子座標形式にも対応している。Z-Matrix が常に表示されていて、Z-Matrix を用いた分子の編集も簡単にできる。

MOPAC6 を同梱しているので、Winmostar のインストール後に直ちに実行できるようになる。GAMESS や Gaussian については、実行ファイルのパスを設定することで、Winmostar から起動出来るようになる。

Winmostar 自身は動作が軽い 2D 表示を特徴としているが、VRML ファイル出力機能を持っているので、VRML ブラウザを用いることで 3D 表示も可能である。

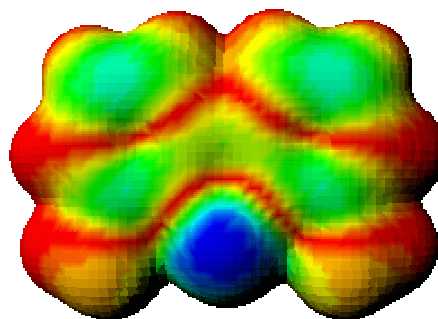
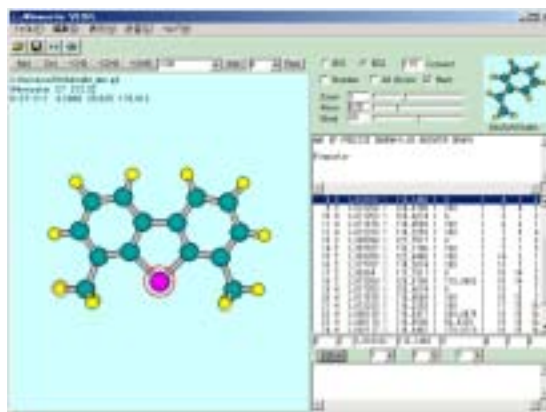
右図は、新機能を利用して等電子密度面に HOMO の絶対値をマッピングした例である。

【謝辞】

本プログラム開発の一部は、情報処理推進機構 (IPA) の平成 16 年度未踏ソフトウェア創造事業『Winmostar : 分子計算支援ソフトウェアの開発』の一環として行っている[6,7]。

【参考文献】

- [1]千田範夫、分子計算支援システム Winmostar の開発、日本コンピュータ化学会 2002 秋季年会、2002 年 11 月
 [2]千田範夫、分子計算支援システム Winmostar の開発 (2)、日本コンピュータ化学会 2003 秋季年会、2003 年 10 月
 [3]千田範夫、分子計算支援システム Winmostar の開発 (3)、日本コンピュータ化学会 2004 春季年会、2004 年 5 月
 [4]千田範夫、分子計算支援システム Winmostar の開発 (4)、日本コンピュータ化学会 2004 秋季年会、2004 年 10 月
 [5]Winmostar web site : <http://winmostar.com/>
 [6]<http://www.ipa.go.jp/jinzai/esp/2004mito2/koubokekka.html>
 [7]未踏ソフトウェア創造事業関連の特設ページ : <http://mito.3016.net/>



4,6ジメチルベンゾフランの HOMO マッピング