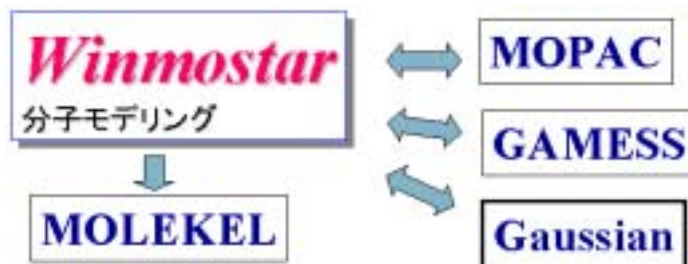


演 題	分子計算支援システム Winmostar の開発 ( 2 )	
発 表 者 ( 所 属 )	千田範夫 ( 出光興産中研 )	
連 絡 先	〒290-0293 千葉県袖ヶ浦市上泉 1280 出光興産(株)中央研究所、解析技術室 TEL 0438-75-2267 FAX 0438-75-7213 E-Mail <a href="mailto:info@winmostar.com">info@winmostar.com</a> URL <a href="http://winmostar.com/">http://winmostar.com/</a>	
キ ー ワ ー ド	分子モデリング, 分子軌道法, MOPAC, GAMESS, Gaussian	
開発意図 適用分野 期待効果 特徴など	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。昨年の発表内容から機能拡張して、さらに使い易くなった。特に、Gaussian 形式の入出力と分子軌道表示ができるようになり、利用範囲が拡大した。	
環 境	適 応 機 種 名	DOS/V
	O S 名	Windows98/Me/NT4.0/2000/XP
	ソ ー ス 言 語	VisualBasic5.0
	周 辺 機 器	
流 通 形 態 ( 右 の い ず れ か に を つ け て く だ さ い )	・日本コンピュータ化学会の無償利用 ソフトとする 独自に頒布する ・ソフトハウス、出版社等から市販 ・ソフトの頒布は行なわない ・その他	具 体 的 方 法  <a href="http://www.vector.co.jp/">http://www.vector.co.jp/</a> または <a href="http://winmostar.com/">http://winmostar.com/</a> から ダウンロード可能
	・未定	

## 1 . はじめに

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。化学教育ソフトあるいは計算化学に初めて取組むためのツールとして使い易く、研究現場で使用する場合でも十分な機能を有している[1]。今回は Gaussian のインターフェイス機能を追加し、さらに利用範囲を拡大した。



## 2 . 開発・動作環境

開発言語 : VisualBasic5.0

( Delphi/Kylix へ移植中 )

O S : Windows98, NT4.0, 2000, XP

メモリー : 3 2 M B 以上

H D D : 1 0 M B 以上

### 3. 機能概要

入出力データ形式：MOPAC、GAMESS、Gaussian、PDB、MOLDA、MOL、CAR等。

表示形式：棒球モデル、空間充填モデル。

分子構築：原子追加、部品追加、部分移動、部分回転、Z-Matrix 操作等。

起動プログラム：MOPAC6、MOPAC7、GAMESS、Gaussian98/03、MOLEKEL 等。

計算結果表示：最適化構造。分子軌道図等。



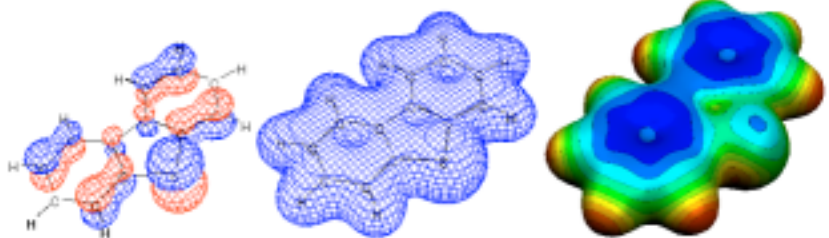
### 4. 主な特徴

棒球モデル表示は、簡易的な陰面消去法を用いて高速描画を実現している。

プログラム内部では、Z-Matrix 形式の座標を常に保持している。分子構築は Z-Matrix の座標を直接入力することも可能であるが、Z-Matrix を意識しないで分子表示画面上で操作することも可能である。

MOPAC と GAMESS のインターフェイス機能に加えて、Gaussian98(03)のデータの入出力と、Gaussian98W の起動を実現した。入力データは、Z-Matrix、XYZ 等の多様な形式に対応している。Gaussian98W の実行は標準画面を経由せず、Winmostar から直接起動する。計算結果の出力ファイルを読み込んで、データ形式にして保存することも可能。

分子軌道図は、出力ファイルの軌道係数から描く方法と、Gaussian ユーティリティーの FormChk、CubeGen を用いて作成した Cube ファイルを用いる方法がある。Cube ファイルからの方法では、MOLEKEL を用いて等電子密度面での静電ポテンシャルのマッピング等もできる。



Winmostar の表示例

MOLEKEL の表示例

### 5. おわりに

近年のパソコンの性能向上は目覚しく、数年前までは大型計算機や高性能WSを使用していた分子軌道計算が通常のパソコンでも充分可能になった。しかし、Windows で使用できるモデリングソフトは高価な割には機能的に問題も多く、計算化学の普及に大きな壁となっている。Winmostar の利用が、この壁を越えるための一助となれば幸いである。

### 6. 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