

演 題	分子計算支援システム Winmostar の開発 (4)	
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 info@winmostar.com URL http://winmostar.com/	
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。VB から Delphi に書き換えて性能向上を図り、新機能として構造クリーンアップと部品登録の追加により、さらに使い易くなった。	
環 境	適 応 機 種 名	PC/AT 互換機
	O S 名	Windows98/Me/NT4.0/2000/XP
	ソ ー ス 言 語	Delphi
	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 ・未定	具 体 的 方 法
		http://www.vector.co.jp/ または http://winmostar.com/ から ダウンロード可能

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][2][3]。今回は Delphi への書き換えによる性能向上について発表した。今回はその後の新機能として、構造クリーンアップと部品登録について主に報告する。

2 . 開発・動作環境

開発言語：Delphi

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

メモリー：64MB以上

HDD：20MB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、部品保存、部品追加、部分移動、部分回転、Z-Matrix 操作、クリーンアップ

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

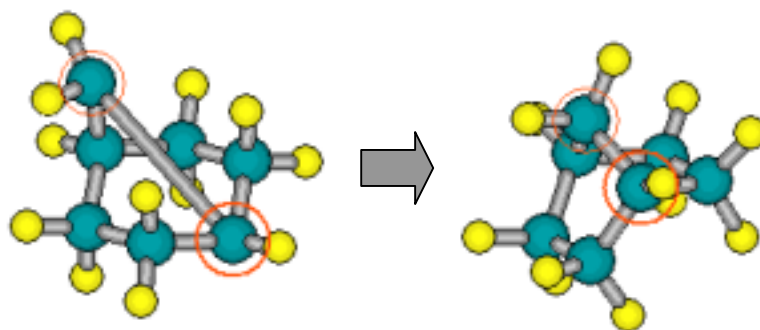
計算結果表示：最適化構造、分子軌道、電子密度、VRML 等。

4．新機能

今回の新機能の目玉は構造クリーンアップと部品登録である。

簡易分子力場法を用いたクリーンアップ（構造最適化）を行うことで、分子軌道法計算のための初期構造が簡単に作成できる。

右図は、シクロヘキサンにメチル基を追加、2 個の水素原子を削除、結合付加して出来た構造をクリーンアップして、ノルボルナンを作成した例である。



部品登録は作成中の分子を部品として登録する機能である。登録した部品は、標準の部品と同様に扱うことができる。

その他、Gaussian、GAMESS の起動方法の改良、VRML ブラウザ対応の変更、不具合修正等を行った。

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

[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