

分子計算支援システム Winmostar の開発 (6)

千田 範夫

出光興産 (株) 中央研究所、第一解析技術室(〒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[1-5]。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。今回は、表示機能の改善等の新機能を追加した。

【方法】

開発言語は Delphi を用いており、ランタイム等が不要な単体実行 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 [6]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。

新機能として、分子表示画面でダブルバッファリングを実装し、回転やアニメーションがスムーズに表示できるようになった。

その他の新機能として、紫外・可視吸収スペクトル計算(CNDO/S)[7]、水素自動付加、10 万超原子表示、Linux マシンへのリモートジョブ制御機能等を実装した。

図は、紫外・可視吸収スペクトルを表示した例である。

【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』の一環として行った[8,9]。

【参考文献】

- [1]千田(2002)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
- [2]千田(2003)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
- [3]千田(2004)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
- [4]千田(2004)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
- [5]千田(2005)分子計算支援システム Winmostar の開発(5),日本コンピュータ化学会 2005 春季年会
- [6]Winmostar web site : <http://winmostar.com/>
- [7]S. Tanaka, Y. Ono, and Y. Ueda, Chem. Pharm. Bull., 1985, 33, 3077.
- [8]<http://www.ipa.go.jp/jinzai/esp/2004mito2/koubokekka.html>
- [9]未踏ソフトウェア創造事業関連の特設ページ : <http://mito.3016.net/>

