

分子計算支援システム Winmostar の開発 (7)

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[1-7]。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、3D 表示等の新機能について報告する。

【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 [8]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。

今回の重要な新機能は、3D 表示機能である。従来の VRML 表示に代わるオリジナルの 3D ビューワを実装したので、VRML ビューワをインストールしなくても高精細 3D 表示が可能になった。3D 表示では、図のような分子軌道等値面や、アニメーション、立体視の表示も可能である。

その他の新機能として、クリーン機能の力場パラメータ自動補完、分子の重ね合わせ機能、Gaussian と GAMESS の連続実行機能等を実装した。

【参考文献】

- [1]千田,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)
- [2]千田,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)
- [3]千田,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)
- [4]千田,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)
- [5]千田,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(2005)
- [6]千田,分子計算支援システム Winmostar の開発(6),日本コンピュータ化学会 2005 秋季年会(2005)
- [7]千田 範夫,分子計算支援システム Winmostar の開発,出光技報,49,(1),106-111(2006)
- [8]Winmostar web site : <http://winmostar.com/>

