

分子計算支援システム Winmostar の開発 (9)

千田 範夫

テンキューブ研究所 (〒290-0026 千葉県市原市諏訪 1-6-1)

【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 [1-9]。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、キーワード設定画面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、インストールしないで 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, Vista に対応し、Winmostar web site [10] で公開中。

【結果】

今回の主な新機能は、キーワード設定画面、多重結合表示、双極子モーメント表示、エネルギー準位表示、等の機能である。

キーワード設定画面は、MOPAC、Gaussian、GAMESS、CNDO/S の入力データに対応している。MOPAC では図のような画面でキーワードを設定でき、初心者でも使いやすい操作法になっている。元のデータに設定画面のメニューにないキーワードがある場合でも、“Others”キーワードとして取り込むことができる。

多重結合表示によって、正しい結合次数を確認して Molfile を作成できるので、Chemish や Conflex 等の解析プログラムの入力に利用できるようになった。

【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] 千田, 分子計算支援システム Winmostar の開発 (7), 日本コンピュータ化学会 2006 秋季年会 (2006)

[9] 千田, 分子計算支援システム Winmostar の開発 (8), 日本コンピュータ化学会 2007 秋季年会 (2007)

[10] Winmostar web site : <http://winmostar.com/>

