



# Winmostar

XA-CHEM-SUITE

2015年4月22日

ユーザビリティ／ローコストを徹底追求した計算化学プリポストGUIです。

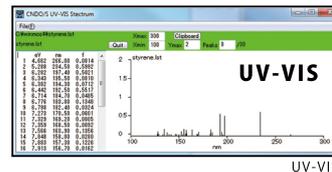
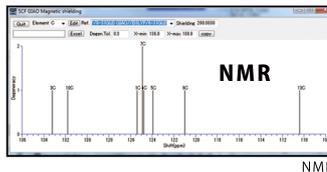
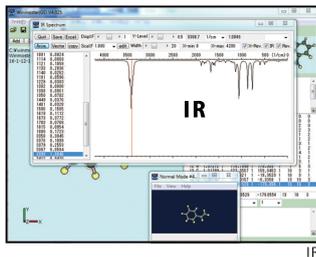
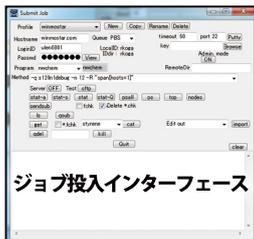
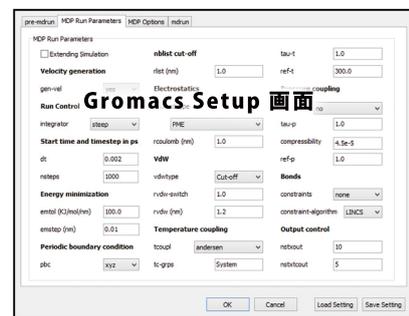
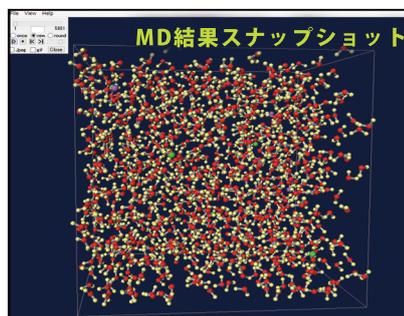
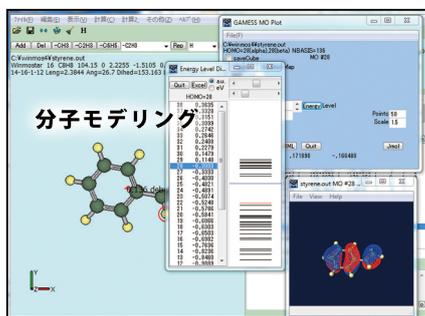
Winmostar™は、分子モデリングから量子化学計算・分子動力学計算の実行、計算結果の表示までをPC上で軽快かつ直感的に実現するパッケージソフトウェアです。新リリースのVersion5では、分子動力学計算を充実させました。

#p2n, pdb, cif, mol, mol2, sdf + 基本フォーマットに対応

無償版：原子数制限したMOPAC6, BalloonおよびCNDO/S内蔵、分子モデリング機能、分子表面積、点群解析 etc

ベーシック：無償版の機能に加え、原子数制限なしのMOPAC6、GAMESS/Firefly, Gaussian, NWChemの量子化学計算のインターフェース機能、ジョブ投入インターフェース etc

MDオプション：Gromacs/LAMMPSの分子動力学計算のプリポスト機能を搭載



## ■動作OS

Windows XP/Vista/7/8 (VMware fusion on Mac OSXも動作確認済)

## ■分子モデリング機能

- 原子単位の追加・変更・移動・削除、置換基の追加、クリーン（分子力学による簡易構造最適化）機能、簡易配座探索機能
- 部分回転・移動・削除・複製、Z-Matrix編集機能
- タンパク質モデラー、溶液モデラー（三種混合）機能、点群解析、結晶モデリング

## ■計算機能

- 内蔵：MOPAC6, Balloon(簡易配座探索機能), CNDO/S(紫外・可視吸収スペクトル計算用)
- 入力データ作成と起動：MOPAC, Gaussian, GAMESS/Firefly, NWChem, Gromacs, LAMMPS
- 分子表面積、体積、Ovality(卵形度)、アスペクト比算出、PIO解析

## ■出力可視化機能

電荷・双極子モーメント、エネルギー準位、構造最適化・反応座標解析・基準振動・MD結果スナップショットアニメーション表示、紫外／可視吸収・NMR・ラマン分光／赤外吸収スペクトル、分子軌道表示、温度・圧力などの熱力学量変化グラフ表示

## ■価格(税別) ※3ヶ月間のフル機能トライアル版あり

- シングルライセンス(永久使用权+1年保守) 民間企業・官公庁 ¥90,000 教育機関 ¥45,000
- 民間企業・官公庁サイトライセンス(年間使用权+保守) ¥400,000
- 教育機関年間ライセンス(年間使用权+保守) キャンパス ¥200,000 学科・専攻 ¥150,000 研究室 ¥90,000

#教育機関年間ライセンスについては、5年分を3年分費用の一括支払でまとめ購入が可能です。

#MDオプション(ベーシック必須)は上記と同額となります。#シングルライセンスの次年度目以降の保守更新は初年度の半額となります。