

分子計算支援システム Winmostar の開発 (8)

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[1-8]。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、振動解析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 [9]で公開中。

【結果】

今回の主な新機能は、振動解析、XYZ 座標系の改善、MOPAC2007 への対応、計算指標の追加である。

振動解析は、MOPAC、Gaussian、GAMESS の出力に対応して、赤外線吸収スペクトル表示と振動のベクトル・アニメーション表示ができる(右図)。

MOPAC2007 は J.Stewart が開発中の最新の MOPAC で、全元素が計算可能な半経験的分子軌道法である[10]。発表者はバグ報告等で MOPAC2007 の開発に貢献した。

XYZ 座標系では、分子の配向を任意に設定し、座標軸の表示によって確認できるようにした。

計算指標として、従来の分子体積・表面積に加えて、Ovality (卵形度) とアスペクト比を追加して、構造活性相関の記述子として利用できるようにした。

【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]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]Winmostar web site : <http://winmostar.com/>
- [10]OpenMOPAC web site : <http://openmopac.net/>

