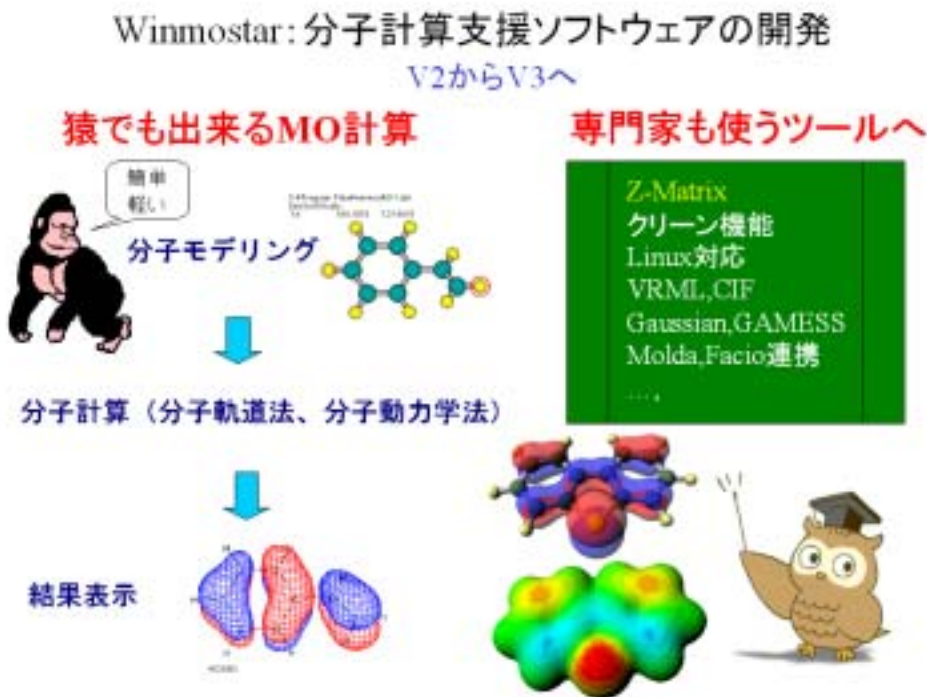


Winmostar: 分子計算支援ソフトウェアの開発
—初心者から専門家まで、計算化学の標準ソフト—
千田範夫(出光興産株式会社中央研究所)

開発済のWinmostarV2をベースにして改良し、より高機能でユーザーフレンドリーな分子計算支援GUIソフトWinmostarV3を開発することを目的とした。

Winmostarの特長は、初級者の人にも使い易い操作性を持つことである。

ユーザーフレンドリーで使い易い特長を活かしたままで、新機能の実装によって、実際の研究開発用としても広範囲に利用可能なプログラムを開発した。



- (1) 表示機能の改善
- (2) 簡易分子力場法を用いたクリーン(構造緩和)機能
- (3) VRML出力機能
- (4) CIF形式データに対応
- (5) Z-Matrixの原子指定順序の最適化
- (6) 10万原子に対応
- (7) Gaussian03のインターフェイス改善
- (8) GAMESSとのインターフェイス改善
- (9) 水素自動付加
- (10) 紫外・可視吸収スペクトル計算
- (11) 国産ソルバーのGUI作成
- (12) Linux対応
- (13) 他GUIソフトとの親和性を向上

