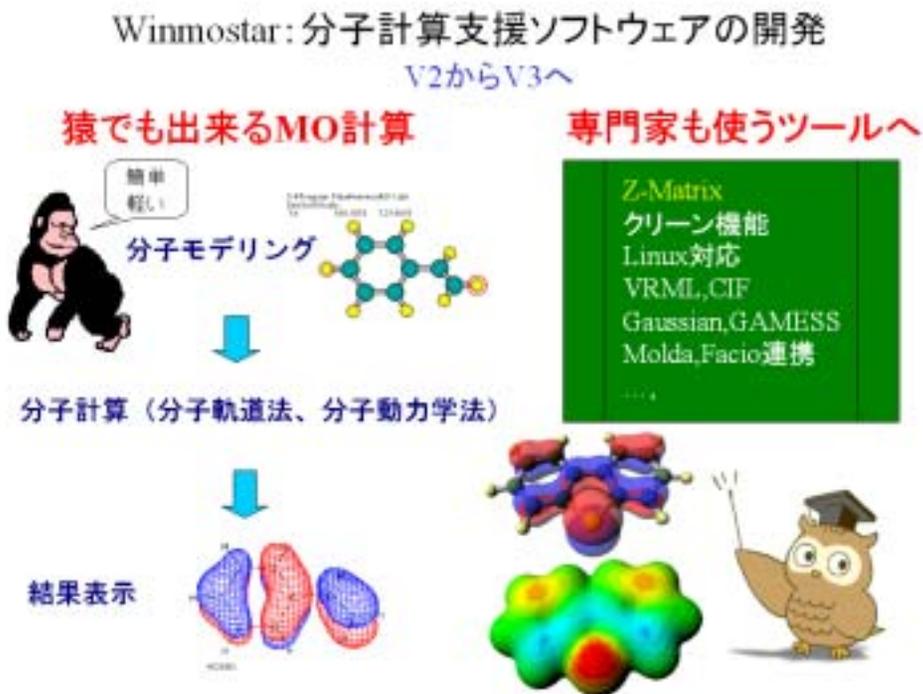


Winmostar: 分子計算支援ソフトウェアの開発
初心者から専門家まで、計算化学の標準ソフト
千田範夫(出光興産株式会社中央研究所)

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

The image displays a complex molecular simulation software interface. It features several key components:

- Ball-and-stick model:** A central view showing a protein structure with atoms represented by spheres (carbon in grey, oxygen in red, nitrogen in blue, hydrogen in white).
- 3D Electron Density Map:** A large, multi-colored (red, green, blue) volume representing the electron density of the molecule.
- Gaussian Orbital Visualization:** A 3D representation of a molecular orbital, showing a central blue sphere with surrounding green and red lobes.
- 3D Electrostatic Potential Map:** A surface representation of the molecule's electrostatic potential, with red indicating negative charge and blue indicating positive charge.
- Absorption Spectrum Plot:** A 2D plot showing the calculated absorption spectrum, with the x-axis representing wavelength (100-600 nm) and the y-axis representing intensity (0-2).
- Terminal/Job Control Window:** A window in the background titled 'Submit Job' showing a list of atomic coordinates and job control buttons (bjobs, bjobs!, lload, ps, top, send, ls, bsub, run, get, *chk, *fchk, bkill, kill, Quit).