GaussView 4 リリース

本年7月にGaussViewの新バージョンGaussView 4がリリースされました。GaussViewは、最も代表的な分子軌道計算ソフトウェアであるGaussian 03のグラフィカルユーザインターフェースで、分子の構築、計算の設定、計算ジョブの投入・管理、ならびに計算結果の視覚化・解析が簡単に行えます。今回は、GaussViewの新機能・改良点について紹介します。

分子構造構築

- カスタムフラグメントライブラリの改良
- 複数の分子構造を含むSDFおよびMOL2ファイルフォーマットへの対応
- 分子および部分構造のミラー反転
- 分子表示のためのポジショニングツールバーの追加
- 原子の立体化学情報（R, S）の表示

計算設定

- Link0 コマンドの指定
- テンプレートを使った迅速な計算設定スキーム
- シングルクリックによるGaussianジョブの実行（Quick launch機能）
- 計算実行中のログファイルの表示

表示機能

2変数Scan計算の3次元ポテンシャル曲面表示：

2変数でScan計算した際の種々の構造での全エネルギーを3次元曲面としてプロットできるようになりました。図1では、Scan変数として、C原子-メチル基間の結合距離とC-N-Cの結合角の2つを使用しています。プロットされた図は、通常のマウス操作で、平行移動、回転、拡大・縮小が可能です。ポテンシャル曲面上のグリッド点をクリックすると、モデルウィンドウ中の分子構造が、対応するフレーム番号の構造に自動的に変更されます。

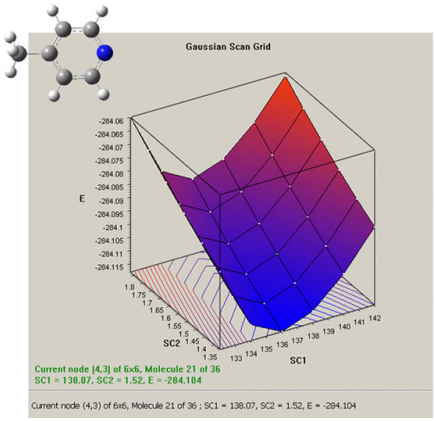

図 1　2変数Scan計算の3次元ポテンシャル曲面表示の例

等高線表示：

分子軌道、電子密度、静電ポテンシャルなどが等高線で表示できるようになりました。図2では、spiroselenuraneの例を表示しています。等高線を表示する平面を指定する際は、原点と法線ベクトルによる平面の指定だけでなく、同一直線上にない3つの原子の選択による平面の指定も可能です。

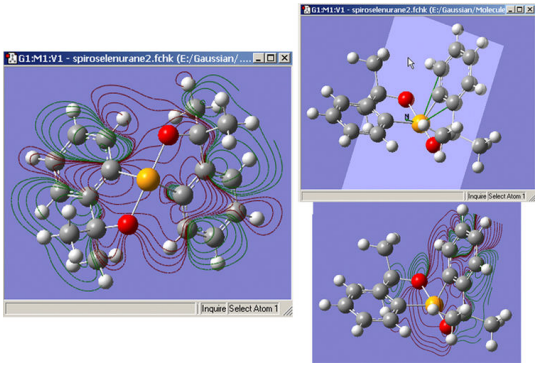

図 2　等高線表示の例

その他、以下の機能追加がなされています。

- 双極子モーメントのベクトル表示
- Cubeプログラムの実行
- ラマン円偏光二色性スペクトル（ROA）、紫外－可視スペクトルの表示
- 周波数依存計算の結果表示
- プロット・スペクトル表示のカスタマイズ
- プロット表示への分子プロパティの追加
- 任意のイメージウインドウの画像ファイルへの保存
- プロット表示の画像イメージ、または数値データとしての保存
- IRCや振動計算結果などの連続構造情報からのGIFアニメーションの作成
- 振動モードに基づき変化した分子構造の表示と保存

ユーザ設定

- ムービーに関するデフォルト設定
- Gauss Viewに関するTips表示
- ファイル拡張子の関連付け（Windows版）