

量子化学計算ソフトウェア Molpro

Molpro 用 GUI gmolpro リリース

Molpro は、配置間相互作用法、クラスタ展開法、多配置 SCF 法、多配置参照摂動法など電子相関の取り扱いに関する様々な計算機能を搭載した量子化学計算ソフトウェアです。この度、Molpro のグラフィカルユーザーインターフェース (GUI) gmolpro がリリースされましたので本稿にてご案内します。

■ gmolpro の構成と機能

gmolpro は 4 つのウィンドウから構成されており、各々以下の機能を担います。

■ Builder ウィンドウ

フラグメントベースで分子構築を行います。分子力場による簡易的な構造最適化機能を備えています。

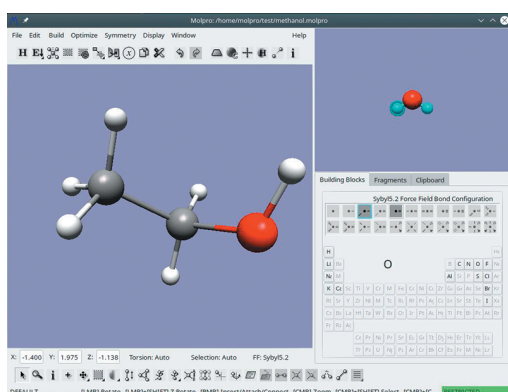


図 1. Builder ウィンドウ

■ Input ウィンドウ

計算手法、基底関数など、計算の入力を指定します。Expert モードによる入力ファイルの直接編集も可能です。

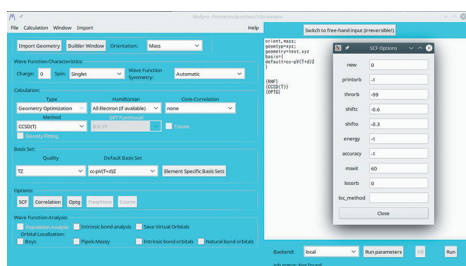


図 2. Input ウィンドウ

■ View ウィンドウ

分子軌道や電荷密度の 3 次元表示、IR/Raman チャートの表示や基準振動モードのアニメーション、ベクトル表示を行います。

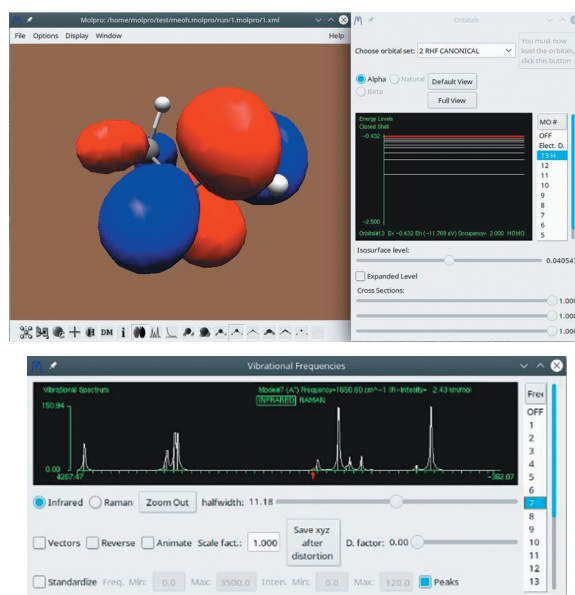


図 3. View ウィンドウ

■ Output ウィンドウ

出力ファイル、ログファイルを表示します。実行中の計算出力がリアルタイムで更新されます。

■ 稼働プラットフォーム

以下の OS でお使いいただけます。

- macOS (10.13 以降)
- Linux (Ubuntu 18.04 以降、Fedora 31、OpenSUSE 15.1/15.2)

- 弊社ウェブサイトには、取り扱い製品、最新のニュース、お客様向けサポート情報、他のサイトへのリンクなどを掲載しております。
- 電子媒体でのニュースレターおよびバックナンバー (RSI ニュースレターを含む) は、弊社ウェブサイトをご覧ください。
- 本ニュースレターは、弊社取り扱い製品をご購入いただきましたサイトのご担当者様にお送りしています。その他に発送のご希望がございましたら弊社までご連絡ください。
- 記載されている会社名及び商品名は、各社の商標または登録商標です。

MOLSIS ニュースレター

No. 17, 2021.04

2021 年 4 月 1 日 発行

発行所 株式会社モルシス

Copyright © 2021 MOLSIS Inc.



株式会社モルシス

URL: <https://www.molsis.co.jp/>

TEL: 03-3553-8030 FAX: 03-3553-8031 E-mail: sales@molsis.co.jp