

半経験的分子軌道計算ソフトウェア



SCiGRESS MO Compact

SCiGRESS MO Compact(サイグレス エムオー コンパクト)は、旧WinMOPACの後継製品であり、分子のモデリングから、分子軌道計算、計算結果のグラフィカルな解析までをシームレスに行うことができるソフトウェアです。

計算エンジンとして、半経験的分子軌道計算プログラム“MO-G”と、紫外・可視吸収スペクトルなどの励起状態の計算に適した“MO-S”を搭載しています。最新版では、新規ハミルトニアン¹⁾の追加による高精度化、高速アルゴリズムによる構造最適化の高速化および収束性の向上など、計算機能が大幅に強化されました。

様々な分子系に対する物性・反応性予測、構造解析など幅広い機能を利用することが可能で、最先端の研究開発および教育への有用性が、豊富な事例により実証されています。

■ 特長

- 物性・反応性予測、構造解析を手軽かつ高速に行えるため、教育現場から、最先端の研究開発まで幅広く適用可能
- 構造最適化、遷移状態計算、溶媒効果計算、各種スペクトル計算など多様な計算が可能
- 遷移金属を含む豊富なパラメータを搭載しており、様々な分子の取り扱いが可能
- 計算結果のグラフィカル表示により、効率的かつ直観的な解析が可能

■ 高速かつ高精度な計算エンジン

1. MO-G: MO-G¹⁾は、様々な分子系に対する物性予測、構造解析のために広く使用されているMOPAC²⁾をベースとした、半経験的分子軌道計算プログラムです。高速計算ルーチンMOZYMEを搭載し、10,000原子³⁾に及ぶ巨大分子系に対する計算を実用的な速度で行うことが可能です。

- サポートされている計算手法: MINDO/3, MNDO, MNDO-d, AM1, PM3, PM5, PDDG/PM3, PDDG/MNDO

MO-G 新機能:

- 新規ハミルトニアン(PDDG/PM3, PDDG/MNDO)の追加による高精度化
- GDIIS法による構造最適化の高速化と収束性の向上。旧MOPAC2006に比べて最大5倍以上の高速化を実現
- 各種しきい値の見直しによる構造最適化の収束性向上
- FONおよびpFONアルゴリズムによる含遷移金属分子のSCF計算の高速化(Ptクラスター(17原子)で旧MOPAC2006に比べて15倍の高速性を実現)

新機能

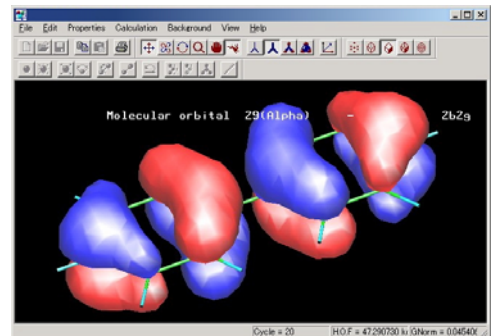
2. MO-S: MO-S⁴⁾は、励起状態の計算に適した半経験的分子軌道計算プログラムです。有機分子の紫外・可視スペクトルを精度良く求めることが可能です。溶媒効果を含めた計算も行えます。

- サポートされている計算手法: CNDO/2, CNDO/S, CNDO/S2, CNDO/S3, ZINDO/S, AM1, PM3, PM5, RM1, PDDG/PM3, PDDG/MNDO

MO-S 新機能:

- 新規ハミルトニアン(MNDO, PDDG/MNDO, PDDG/PM3, RM1)の追加
- GDIIS, RFO, Approximate Hessian, 非局在化内部座標による高速アルゴリズムの搭載による構造最適化機能の強化。旧MOPAC2006に対し最大8倍以上の高速化と収束性の向上を実現

新機能



■ 可能な計算

- MOZYME法によるLinear Scaling SCF計算
- 蛋白質構造入出力に関するユーティリティ機能
- 構造最適化 (EF, BFGS, LBFGS, NLLSQ, SIGMA法)
- 遷移状態計算
- エネルギー分割
- 溶媒効果計算(COSMO法, TOMASIモデル, Linear-scaling COSMO法)
- 内部反応座標計算(IRC)
- 動的反応座標計算(DRC)
- 項間交差構造の解析
- 超分極率計算
- 対称性の自動認識(8次までの点群表記)
- 赤外スペクトル計算
- 紫外・可視スペクトル計算
- 基準振動解析
- 励起状態計算
- 開殻系, ラジカルの計算
- 周期境界条件を用いた計算
- Parametric Molecular Electrostatic Potential
- ESP計算による原子電荷

*1: MO-Gは、MOPAC2006およびMOPAC2002を基に富士通が独自に開発・製品化しました。

*2: MOPACは、Dr. James Stewartの米国およびその他の国における登録商標です。

*3: 5,000原子以上は単体モジュールの計算のみ対応

*4: MO-Sは、MOS-Fの後継機能です。

幅広い元素への対応

- MNDO法、AM1法、PM3法、PM5法において扱える典型元素・遷移金属の種類を統一^{*1}。従来特定の手法でしか計算できなかった元素に関して、これらの手法を適用可能です。

*1: 希ガスおよびPo、At、Fr、Raを除く典型元素およびZn、Cd、Hg (全37種)

- 遷移金属は合計13種^{*2}に対応。多様な系を実験対象とすることが可能です。

*2: Sc、Ti、V、Cr、Fe、Co、Ni、Cu、Zr、Mo、Pd、Ag、Pt

計算可能元素種^{*} 青: 典型元素 赤: 遷移金属

1A	2A	3A	4A	5A	6A	7A	8				1B	2B	3B	4B	5B	6B	7B	0
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	
H																		
Li	Be											B	C	N	O	F		
Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl		
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr		Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br		
Rb	Sr		Zr		Mo					Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	
Cs	Ba									Pt		Hg	Tl	Pb	Bi			

^{*}一部のハミルトニアンでのみサポートされている元素種もあります。詳細は、Webサイトをご参照下さい。

多彩な解析機能

- SCIGRESS MO Compactでは、分子軌道など各種計算に対する、種々の解析が可能です。
- 解析結果を高品位に描画でき、論文、レポート、プレゼンテーション資料の作成にも有用なツールです。

- 表示可能な計算・解析結果
 - 最適化構造
 - 生成熱
 - 原子電荷(Mulliken)
 - 超分極率
 - 双極子モーメント
 - 基準振動
 - 分子軌道、分子軌道重ね合わせ
 - 電子密度 (Total Density、Spin Density、Difference Map)
 - 紫外・可視吸収スペクトル
 - IRスペクトル
 - IRC/DRC計算
 - 反応座標計算
 - 溶媒中の系のエネルギー
 - Gradient Norm
 - エネルギー分割
 - ESP計算による原子電荷
 - 結合次数
 - 静電ポテンシャル
 - Parametric Molecular Electrostatic Potential
 - 励起状態
 - outファイル表示

高度なモデリング・表示機能

■ 分子機能構築機能^{*1}

- 新規作成/既存ファイル読み込み
 - テンプレート100種
 - 原子ラベル変更
 - 原子指定番号変更
 - 分子上の原子&結合削除
 - 結合距離、結合角及び二面体角の表示/変更
 - 定義された結合長への変更
- *1: タンパク質のモデリング機能はありません

■ 分子の表示形式

- 原子ラベル表示
- 原子指定番号表示
- 水素非表示機能
- 分子モデル表示: 線画、ハーフベクター、ポール&スティック、スペースフィル
- 分子軌道/電子密度表示: 点描、線描、塗りつぶし及びこれらの半透明、スムージング

製品構成・価格

■ SCIGRESS MO Compact V1 Std^{*1}:

最大200原子まで計算可能です。初めてお使いの方や、比較的小規模な計算に適しています。

■ SCIGRESS MO Compact V1 Pro^{*1}:

200原子以上^{*2}の計算が可能な製品です。巨大分子系などの大規模計算に適しています。

*1: それぞれ、アップグレード版、教育機関向けパッケージをご用意しています。

*2: 計算可能な原子数の上限は、メモリ、ハードディスク容量、キーワード、および計算に使用するモジュール(GUI連携版、DOSプロンプト版)により異なります。

動作環境

- OS: Windows[®] XP^{*1,2}、Windows[®] Vista^{*1,2}
- CPU: Pentium4 3GHz相当以上 (Pentium M 1GHz相当)^{*3}
- RAM: 2GB以上 (512MB)^{*3}
- HDD空き容量: 5GB以上 (2GB)^{*3}

*1: 仮想マシン環境およびリモートデスクトップ環境を除く

*2: Windows[®]は、米国Microsoft社の米国およびその他の国における登録商標です。

*3: カッコ内は最小構成

インターネットで製品情報がご覧になれます。

URL: <http://software.fujitsu.com/jp/scigress/mocompact/>

富士通株式会社 バイオIT事業開発本部

〒261-8588 千葉市美浜区中瀬1-9-3 幕張システムラボラトリ
Tel: 043-299-3680, Fax: 043-299-3019
Mail: biochem-info@ml.css.fujitsu.com