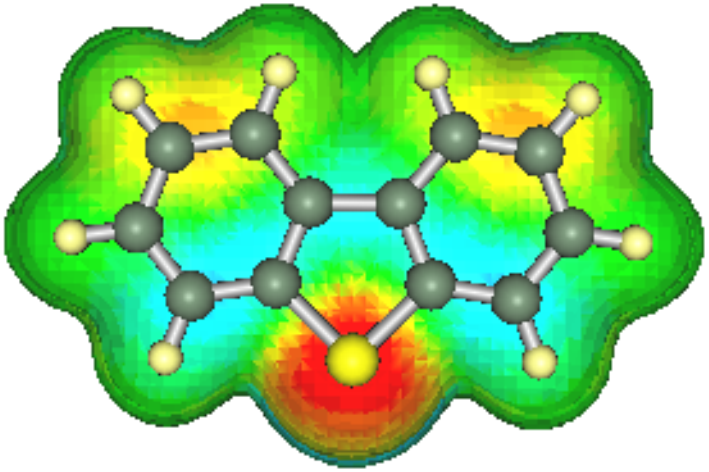
分子科学計算ソフトウェア (Winmostar)の開発

第23回 エンバカデロ・デベロッパーキャンプ東京

株式会社テンキューブ研究所　千田範夫



千田＝1000＝10^3 ＝テンキューブ

Tencube/WMNB V3.807d

ファイル(F) 編集(E) 表示(V) 計算(C) 計算2 その他(Z) ヘルプ(H)

Add Del -CH3 -C2H3 -C6H5 -CH3 Rep H Chng

BS1 BS2 1.15 Connect

Number All Atoms Mark

Zoom 1
Atom 0.25
Bond 10

undo

E:¥home¥ccs¥winmos¥temp.dat
Winmostar 2 13.02 0 -0.0852 0 0
1-2-1-2 Leng=1.1 Ang=0 Dihed=0 Lper=-999 C

AM1 EF PRECISE GNORM=0.05 NOINTER GRAPHF MMOK

Winmostar

1	C	0	1	0	1	0	1	0	0	0
2	H	1.1	1	0	1	0	1	1	0	0

1 C 0 0 0 0 0 0

Debug 1 1 1

Y
Z X

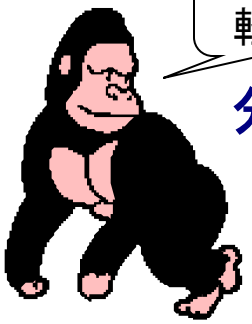
Safari sales-invoice リモートサポートサービス | NT... runts.bat - ショートカット フレッツ・サービスのご案内 SetupImgToo... winmos3tr LogMeTT 千田
acio.exe - ショートカット Facio utodock - ショートカット
Every Thurs
http://www.

Winmostar：分子計算支援ソフトウェアの開発

V2からV3へ

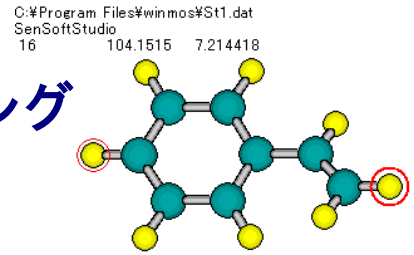
2004 IPA未踏ソフト創造事業
VisualBasicからDelphi7に書き換え

猿でも出来るMO計算



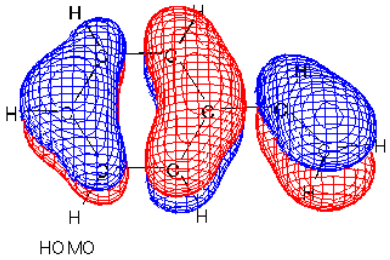
簡単
軽い

分子モデリング



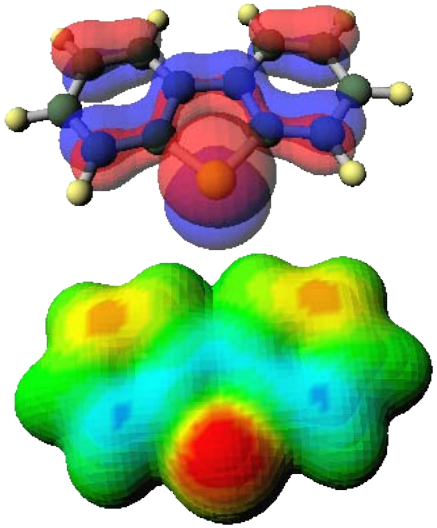
分子計算（分子軌道法、分子動力学法）

結果表示



専門家も使うツールへ

- Z-Matrix
- クリーン機能
- Linux対応
- VRML,CIF
- Gaussian,GAMESS
- Molda,Facio連携
- …,



天才プログラマー／スーパークリエータ 2005/10

アカデミックフリー

デファクトスタンダードを狙う

Winmostar

for WindowsXP/Vista/7

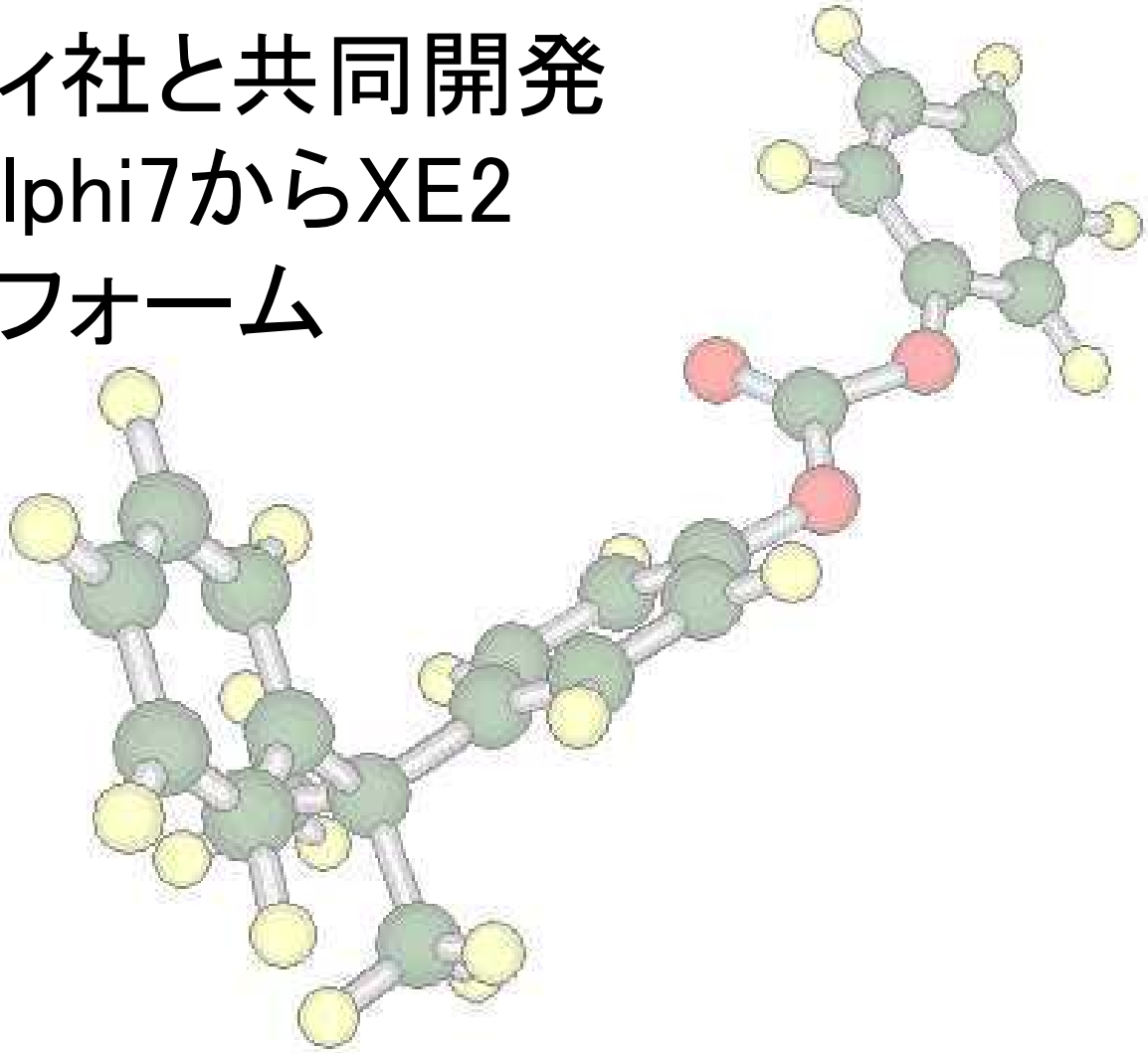
商用版 （一般:99,750円、教育機関:49,350）

Tencube/WM システム最小構成

- Intel Pentium III 以上または AMD Athron
- Windows XP , Vista , 7
- Microsoft Internet Explorer 5.01 以降
- メモリー実装: 256MB 以上
- 空きディスク容量:512MB 以上
- CD-ROMドライブ
- ディスプレイ解像度: 1024*768 以上

Winmostarの将来？

クロスアビリティ社と共同開発
開発環境をDelphi7からXE2
マルチプラットフォーム
64bit版
新機能



Winmostar Home Page

English

[Top] [Download] [Manual] [Link] [BBS] [About]

インターネット募金

インターネット社会の安全で健全な発展と災害支援

みなさまのご支援よろしくお願いいたします。

この募金に協力する

募金先団体名
Yahoo!募金

これまでの募金総額 1,316,882,347円

» すべての募金を一覧で見る «
» このブログパーツのはり方 «

0226436 | view | アクセス解析 | since 2002/02/09

mailto:support@winmostar.com

2012/10/13,14 日本コンピュータ化学会秋季年会で出展します。

X-Ability クロスアビリティ

日本語 English

ホーム | 計算科学 | センサネットワーク

ニュース
会社概要
お問い合わせ

更新日: 2012/8/28

計算化学エントリーセット カタログ ※関連資料: GA
XA-CHEM-SUITE カタログ
フィールドルータ™ / FieldRouter™ カタログ ※
Allinea DDT/OPT パンフレット ※日本の代理店で

ニュース

2012/10/14-17
生命医薬情報学連合大会で展示を行います。 ウェブ

2012/9/18-21
分子科学討論会2012東京で展示とポスター発表を行

2012/9/14
IPABで弊社代表が講演します。 ウェブサイト

クラウド
京
TSUBAME
FOCUS

並列クラスター計算機

SSH

Tencube/WMNB V3.805w

ﾌｧｲﾙ(F) 編集(E) 表示(V) 計算(C) 計算2 その他(Z) ﾍﾙﾌﾟ(H)

Add Del -CH3 -C2H3 -C6H5 -CH3 Rep H Chng

BS1 BS2 1.15 Connect

Number All Atoms Mark

Zoom 1
Atom 0.25
Bond 10

undo

E:¥home¥ccs¥winmos¥temp.gjf
Winmostar 2 13.02 0 -0.0852 0 0
1-2-1-1 Leng=1.1 Ang=0 Dihed=0 Lper=-999

```
%nproc=1
!%chk=temp
# hf/sto-3g opt pop=full gfprint

Winmostar

0 1
```

1	C	0	1	0	1	0	1	0	0	0
2	H	1.1	1	0	1	0	1	1	0	0

1 C 0 0 0 0 0 0

Debug 1 1 1

Y
Z X

CamStudio

EasyFace Manager

Winmostar

LogMeTT

Tencube/WMNB V3.805w

ﾌｧｲﾙ(F) 編集(E) 表示(V) 計算(C) 計算2 その他(Z) ﾍﾙﾌﾟ(H)

Add Del -CH3 -C2H3 -C6H5 -C2H3 Rep H Chng

BS1 BS2 1.15 Connect

Number All Atoms Mark

Zoom 1
Atom 0.25
Bond 10

undo

E:¥home¥ccs¥winmos¥temp.gjf
Winmostar 16 104.15 0 3.8706 -0.9071 0.3303
16-12-12-2 Leng=7.2844 Ang=0 Dihed=0 Lper=-999 H

```
%nproc=1
!%chk=temp
# hf/sto-3g opt pop=full gfprint

Winmostar

0 1
```

1	C	0	1	0	1	0	1	0	0	0
2	C	1.4938	1	0	1	0	1	1	0	0
3	C	1.39504	1	120.0019	1	0	1	1	2	0
4	C	1.39504	1	119.9984	1	179.9993	1	1	2	3
5	C	1.39504	1	120.0021	1	0.028	1	4	1	3
6	C	1.39505	1	119.9993	1	0.028	1	3	1	4
7	C	1.39505	1	119.9979	1	-0.0166	1	5	4	1
8	H	1.09967	1	119.998	1	179.972	1	4	1	3
9	H	1.09966	1	120.0066	1	179.9743	1	5	4	1
10	H	1.09966	1	120.0016	1	-0.0044	1	3	1	2
11	H	1.09966	1	120.0033	1	179.9929	1	6	3	1
12	H	1.09966	1	120.0049	1	-179.984	1	7	5	4
13	C	1.32591	1	122.7153	1	160	1	2	1	3
14	H	1.09823	1	114.5621	1	179.9953	1	2	1	13
15	H	1.09828	1	122.713	1	-0.0013	1	13	2	1
16	H	1.09828	1	122.7184	1	179.9999	1	13	2	15

16 H 1.098282 122.7184 179.9999 13 2 15

Debug 1 1 1

CamStudio

default Default
60 port 22 Putty
¥home¥ccs¥winmos Browse
Admin. mode hosts
ON
group
Edit log import
clear

/temp/winmos.x
/temp/script.pbs
/temp/temp.gjf
/temp/st_321g1.log
/temp/st_321g1.gjf

/temp/winmos.x
/temp/script.pbs
/temp/temp.gjf
/temp/st_321g1.log
/temp/st_321g1.gjf

EasyFace Manager
Winmostar
LogMeTT

YouTube winmostar ランキング

次のキーワードの検索結果: winmostar

フィルタ

winmostar

分子計算支援ソフトの紹介Winmostarの作者です。

FOCUSスパコンでGaussian09を利用するためのTencube/WM(Winmostar)講習会

チャンネル　チャンネル: winmostar | 11 本の動画 | 登録者 17 人

Winmostarによる分子モデリング、最初の一歩

Winmostarの分子モデリングは簡単です。まず、最初はこれから。winmostar.com

チャンネル: winmostar | 2 年前 | 再生回数 482 回

FOCUSスパコンでGaussian09を利用するためのTencube/WM(...

FOCUSスパコンでGaussian09を利用するためのTencube/WM(Winmostar)講習会資料,構造最適化,分子軌道表示,振動解析,NMR

NEW　チャンネル: winmostar | 5 日前 | 再生回数 19 回

C60 Fullerene construction with Winmostar

Winmostarによる、フラーレンのモデリングwinmostar.com

チャンネル: winmostar | 2 年前 | 再生回数 820 回

Google 千田範夫

検索

約 871 件（0.25 秒）

ウェブ
画像
地図
動画
ニュース
ショッピング
もっと見る

この場所の付近を検索...
現在地を入力
設定

ウェブ全体から検索

Profile - Winmostar
winmostar.com/profile.html - キャッシュ
氏名, **千田範夫**. 性別, ♂. 生年, 1947年. 出身地, 石川県小松市. 最終学歴, 金沢大学大学院工学研究科修士課程修了(1972). 経歴, 1972年 金沢大学大学院工学研究科修士課程修了 1972年 出光興産株式会社千葉製油所 1973年 同 中央研究所（担当 ...
このページに 5 回アクセスしています。前回のアクセス: 12/08/28

[PDF] 「人に歴史あり、CAMMにこの人あり」－Winmostar 開発秘話（1 ...
winmostar.com/Winmostar_insidestory.pdf
ファイルタイプ: PDF/Adobe Acrobat - クイックビュー
出光興産中研 **千田範夫**. 1. 学生時代. 私は学生時代から電子計算機(コンピュータ)を使っていますが、同年代ではめずらし. いほうだと思います。特に、工業化学科のようなところでは、コンピュータを使えるのは. 数人しかいませんでした。きっかけは、研究室の ...
このページに 5 回アクセスしています。前回のアクセス: 12/08/13

千田範夫 (winmostar) on Twitter