

# Tencube/WM

Tencube/WMは、分子のモデリングから分子軌道計算、計算結果の表示までをWindows上で実現するソフトウェアです。

Winmostarの全機能に加えて、Windows上のジョブスケジューラと、Unix(Linux)マシンへのジョブ投入機能を有しています。

MOPAC6とCNDO/S(紫外・可視吸収スペクトル計算)を内蔵し、GAMESSとGaussianのインターフェイス機能もあります。Tencube/WMひとつでこれらのプログラムを利用した計算が可能になっています。

マウスによるグラフィカルな分子の編集だけでなくZ-Matrixと分子を見比べながらの直接編集が可能、動作が軽快など、従来の計算フロントエンドツールとは一線を画しています。

## ■動作OS

Windows 2000/XP/Vista/7

## ■分子構築機能

操作方法は単純で、直感的に操作でき、初心者も短時間で習熟できます。

原子単位の追加・変更・移動・削除に加えて、置換基の追加や、部分的に回転・移動・削除を行う機能に、クリーン(分子力学による簡易構造最適化)機能を用いることで、初心者でも簡単に分子構築を楽しむことができます。また、Z-Matrix編集機能も備えており、MOPACやGaussianのZ-Matrix座標の設定も容易です。

## ■計算機能

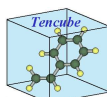
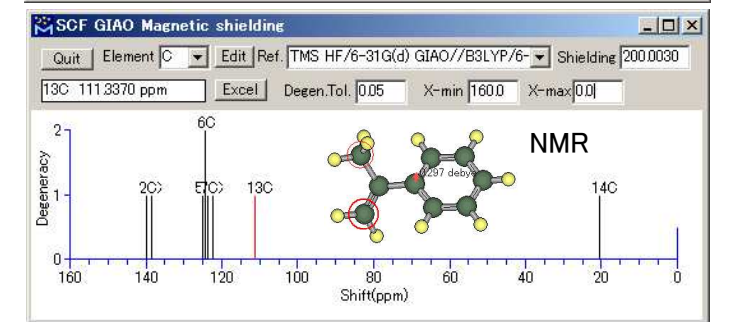
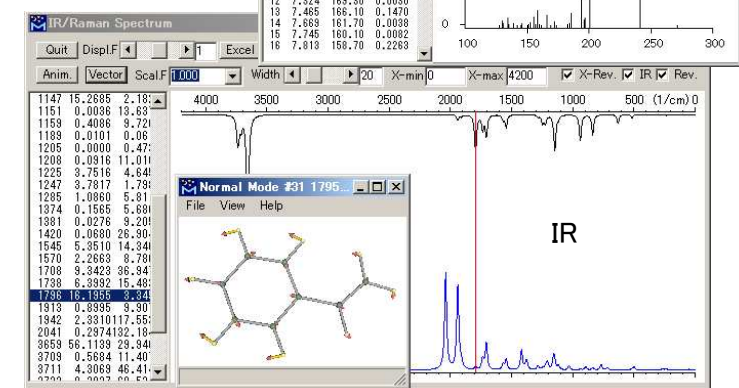
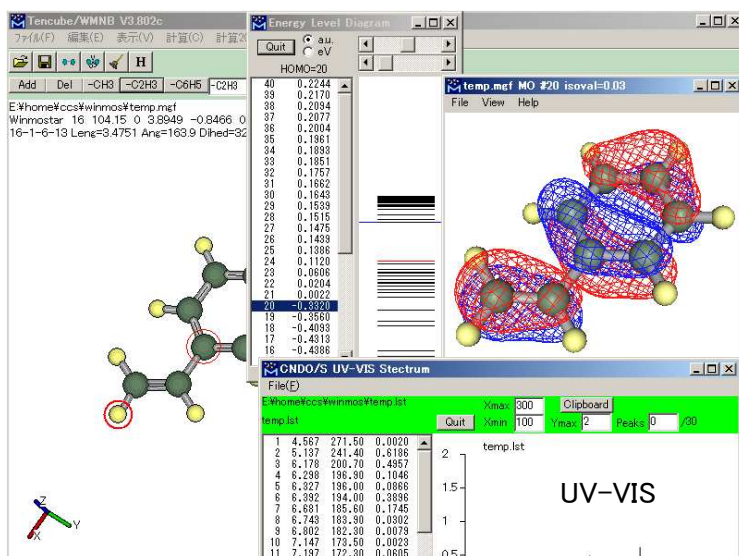
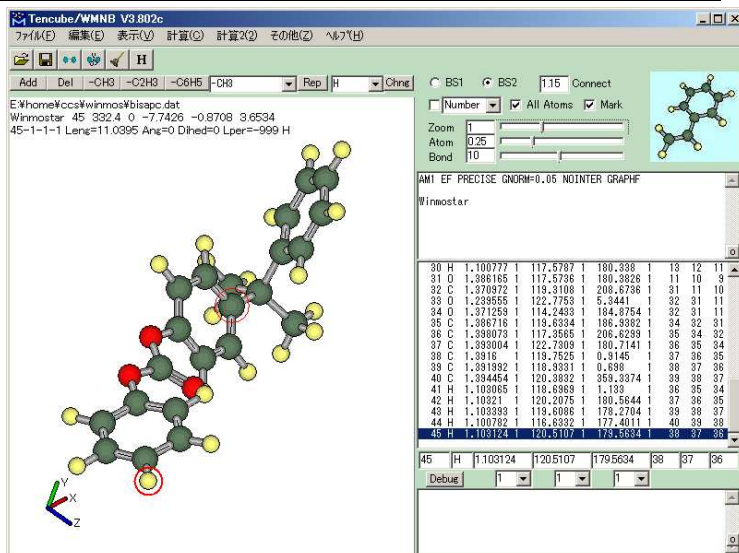
- ・内蔵: MOPAC6とCNDO/S(紫外・可視吸収スペクトル計算用)
- ・入力データ作成と起動: 殆ど全てのバージョンのMOPAC、Gaussian、GAMESS
- ・分子表面積、体積、Ovality(卵形度)、アスペクト比の算出
- ・PIO解析

## ■出力可視化機能

- ・最適化構造、原子電荷、双極子モーメント、エネルギー準位、ステレオ表示
- ・構造最適化・反応座標解析アニメーション
- ・紫外・可視吸収スペクトル、NMRスペクトル
- ・赤外吸収スペクトル、基準振動アニメーション・ベクトル
- ・分子軌道表示

## ■価格

- 一般・シングルユーザー ¥99,750
  - 教育機関・シングルユーザー ¥49,350
- サイトライセンスにも対応いたします。



株式会社  
テンキューブ研究所

〒290-0026 千葉県市原市諏訪1-6-1  
TEL:0436-25-1964 FAX:0436-25-1964

<http://winmostar.com/> E-Mail: [support@winmostar.com](mailto:support@winmostar.com)