

PIO with Winmostar

1 . コンパイル

Cygwin上で、Cygwin無しで動くexeをビルド

```
g77 -O -mno-cygwin -o *.exe *.f
```

```
readfort7.f, pio.f, lcao2.f, lcao2fchk.f
```

lcao2.fはJmolで読込できるように修正

g03も可

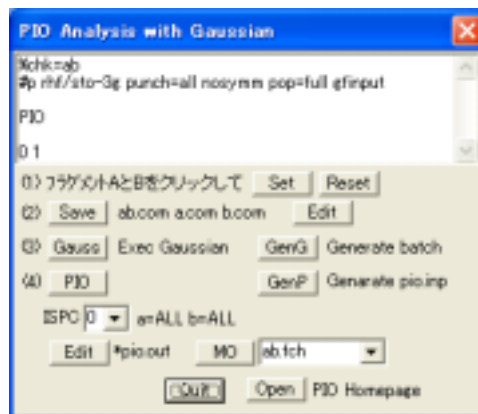
2 . lcao2fchk.f作成

Winmostar現バージョンで*.logからMOを表示するには、18番原子(Ar)以下で、基底関数はSTO-3G,3-21G系,6-31G系に限定されるので、*.fchkを作成して、cubegenを用いてcube fileを作成してからMO表示する。

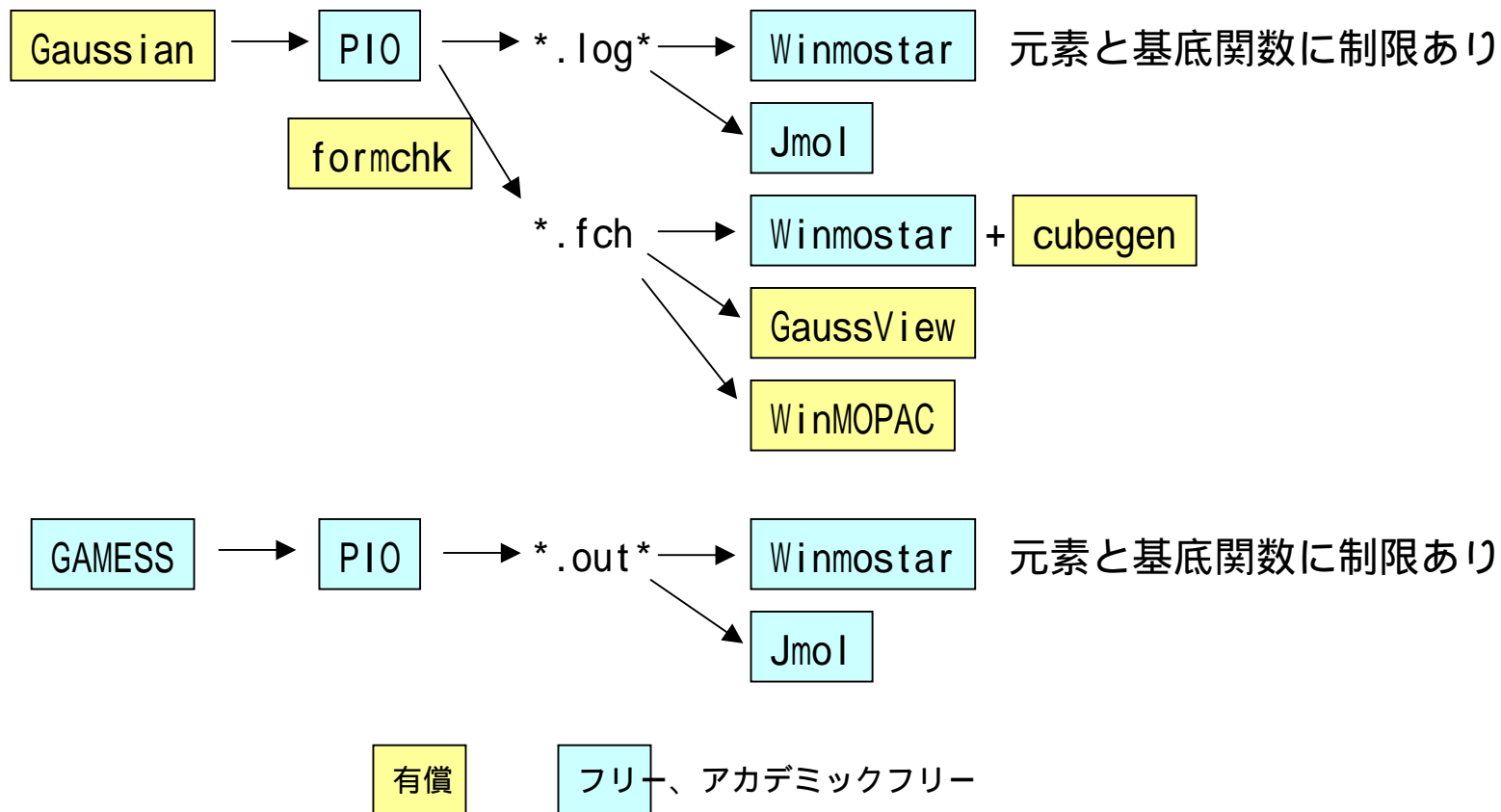
3 . GAMESS用作成

```
readgamout.f, lcao2gamout.f, lcao2gampun.f
```

4 . WinmostarのGUIでPIO解析



5 . 軌道表示



今後の予定

ブタジエン - エチレン以外の事例を確認

修正・改良 (エラーチェック、チューンナップ)

マニュアル作成

WinmostarのMO表示機能を拡張して、Winmostarだけで軌道表示の制限をなくする。