

Windows 版 MOPAC (オープンソース版) インストールマニュアル

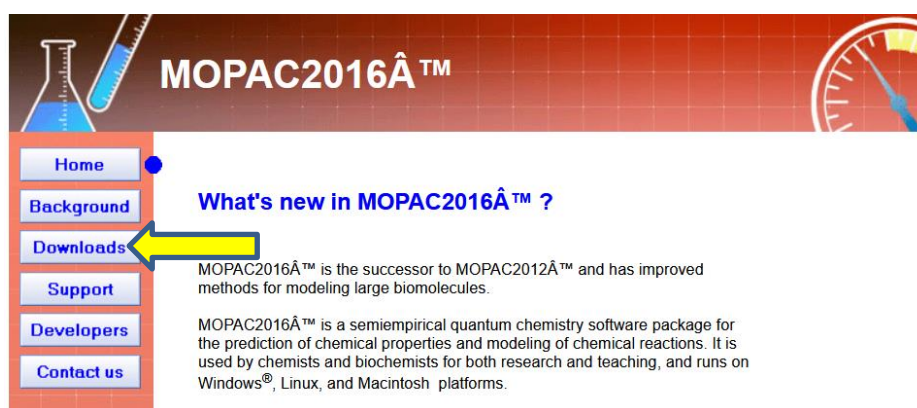
2025 年 2 月 17 日

Winmostar にはあらかじめ **MOPAC6** と **MOPAC7** (いずれもパブリックドメイン) が同梱されているため、**MOPAC6**、**MOPAC7** を使って計算する分には本書の操作は不要です。本書では、2022 年以降にリリースされたオープンソース版の MOPAC のインストール方法を紹介します。以下、64bit 環境での手順を示します。

1. オープンソース版 MOPAC のダウンロードとインストール

1.1) MOPAC サイト内の[MOPAC2016 Home Page]にブラウザを用いてアクセスする。

<http://openmopac.net/home.html>



1.2) 「Downloads」をクリックすると次の画面が表示される。



MOPAC2016™

Home
Background
GUIs
Support
Developers
Contact us

MOPAC has been re-released under the open-source Apache license, and users no longer need to sign a license agreement.

Do not request a license.

Latest [open-source](#) release (openmopac@gmail.com for support):

[Available on conda-forge](#) (installation command: "conda install -c conda-forge mopac")

[Download MOPAC for Linux](#) (graphical installer for Linux distributions with Qt support)

[Download MOPAC for Mac](#) (right-click the installer and select "open" to satisfy Gatekeeper)

[Download MOPAC for Windows](#) (click "more info" and "run anyway" to satisfy Defender)

[Download MOPAC for Linux](#) (minimal tarball for Linux distributions without Qt support)

[Download MOPAC for Mac](#) (minimal zip file if Qt installer has problems)

[Download MOPAC for Windows](#) (minimal zip file if Qt installer has problems)

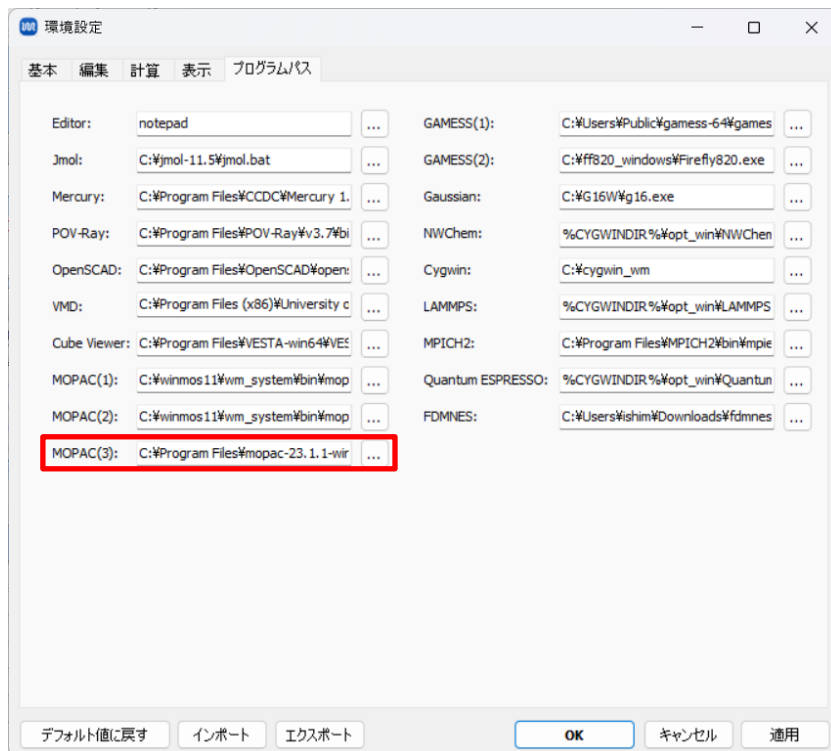
Version = [23.1.1](#) (February 11, 2025 release)

1.3) 「Download MOPAC for Windows (minimal zip file if Qt installer has problems)」をクリックして、zip ファイル(2025年2月17日時点で mopac-23.1.1-win.zip)をダウンロードする。

1.4) 展開先を指定してダウンロードした.zip フォルダを展開する(例えば展開先として C:\Program Files、ただし C:\Program Files 配下での操作は多くの場合にユーザーアカウント制御(管理者権限)が要求される)。

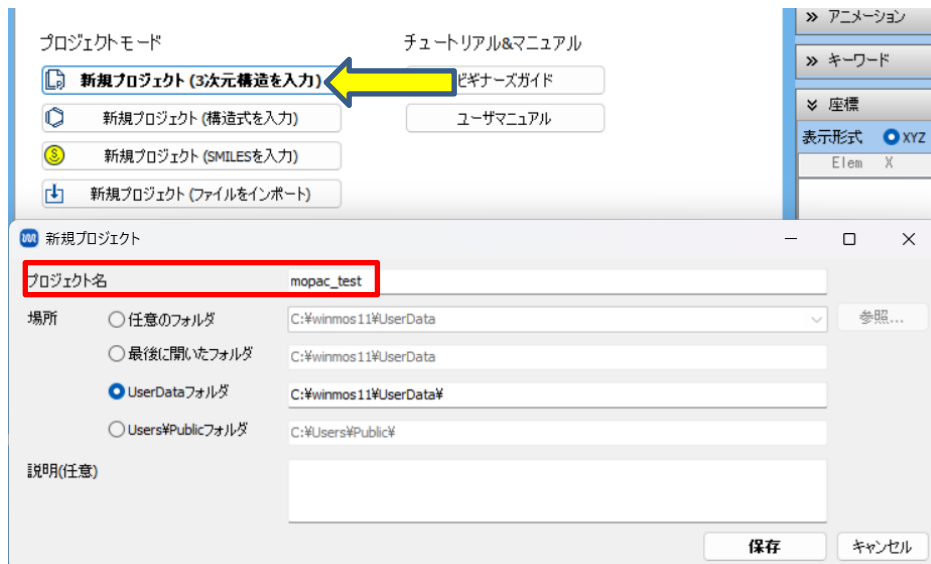
2. Winmostar のパス設定 (Winmostar 無償版では設定不可)

2.1) Winmostar がオープンソース版 MOPAC を呼び出せるようにパスを設定する。Winmostar のツール | 環境設定をクリックして環境設定ウィンドウを開く。環境設定ウィンドウのプログラムパスタブを開き、MOPAC(3):の[...]ボタンをクリックする。表示されるダイアログで、展開したファイルの一つである MOPAC 実行ファイル mopac.exe(展開先が C:\Program Files の場合、C:\Program Files\mopac-23.1.1-win\bin\mopac.exe) を設定し OK をクリックする。

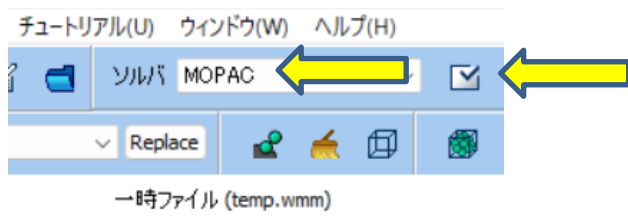


3. Winmostar 上でのオープンソース版 MOPAC の動作確認

3.1) 新規プロジェクトを(3次元構造を入力)をクリックして、プロジェクト名に任意の文字列を入力し、保存する。

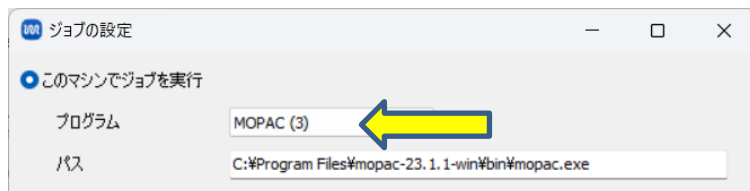


3.2) ソルバを「MOPAC」に設定した上で、右隣のワークフロー設定ボタンをクリックする。「水素を付加し CH4 として計算しますか？」の質問には「はい」を選択する。

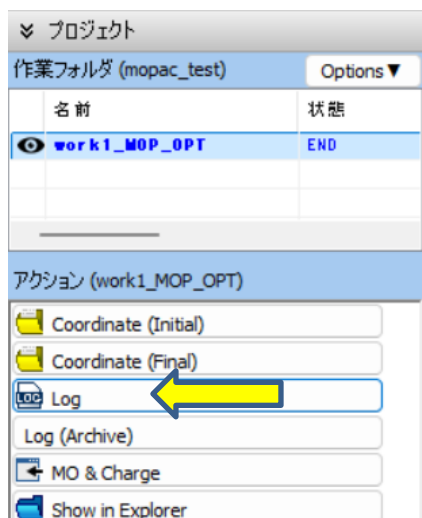


3.3) MOPAC Workflow Setup ウィンドウで OK をクリックする。

3.4) ジョブの設定ウィンドウのプログラムを「MOPAC(3)」に変更して、実行ボタンをクリックする。



3.5) 作業フォルダの欄が青文字となり状態が END になった後、その下のアクション欄の Log ボタンをクリックする。



3.6) 開いたファイルの冒頭に書かれている MOPAC のバージョンがインストールしたものであることを確認する。

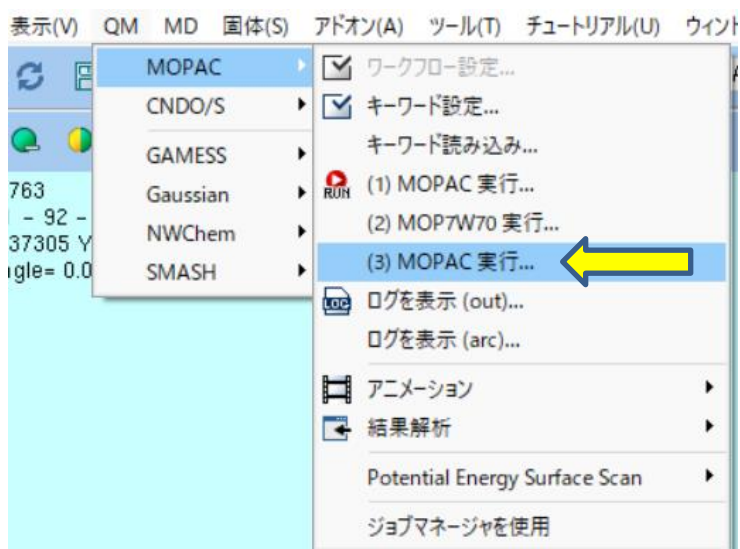
```
*****
**                                     **
**                                     MOPAC v23.1.1                             **
**                                     **
**                                     **
**                                     *****
**                                     Digital Object Identifier (DOI): 10.5281/zenodo.6511958
**                                     Visit the DOI location for information on how to cite this program.
**                                     **
**                                     *****

                                  AM1 CALCULATION RESULTS

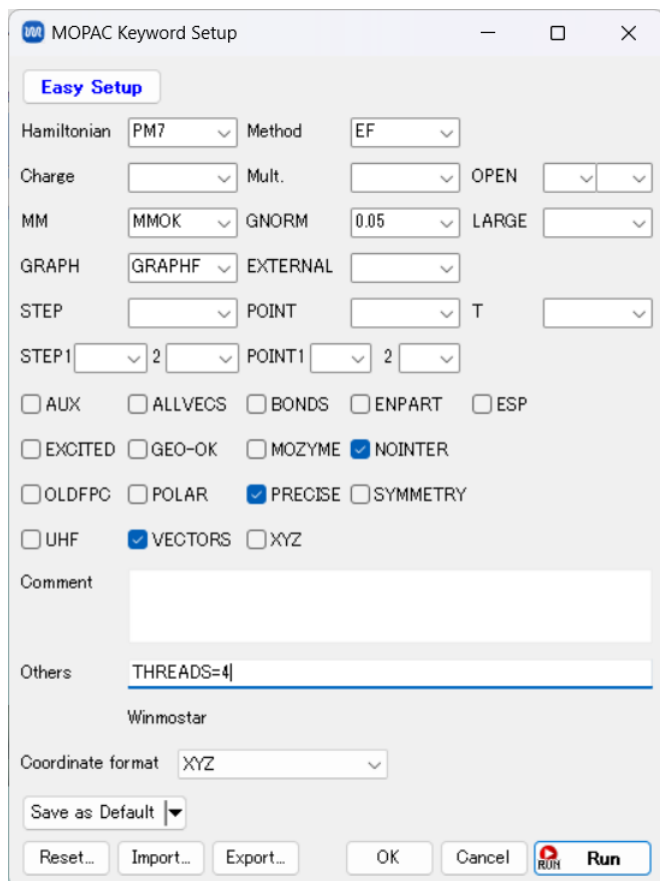
*****
*  CALCULATION DONE: (MAX THREADS = 8)             Thu Feb 13 10:22:49 2025  *
*  AM1      - The AM1 Hamiltonian to be used
*  MMOK    - APPLY MM CORRECTION TO CONH BARRIER
*  PRECISE  - TIGHTER CRITERIA TO BE USED
*  EF      - USE EF ROUTINE FOR MINIMUM SEARCH
*  T=      - A TIME OF 172800.0 SECONDS REQUESTED
*  DUMP=N   - RESTART FILE WRITTEN EVERY 7200.0 SECONDS REQUESTED
*  GNORM   - EXIT WHEN GRADIENT NORM DROPS BELOW 0.050
*  NOINTER  - THIS KEYWORD HAS BEEN REPLACED BY PRINT
*  VECTORS  - FINAL EIGENVECTORS TO BE PRINTED
*  GRAPH    - GENERATE FILE FOR GRAPHICS
*****
AM1 EF PRECISE GNORM=0.05 NOINTER GRAPHF VECTORS MMOK
```

注意点 1：プロジェクトモードでオープンソース版 MOPAC を使って計算する場合、3.4)の**ジョブの設定**ウィンドウの**プログラム**を「MOPAC(3)」に変更する操作を常に行う。もしくは 2.1)の `mopac.exe` の設定を[MOPAC(3):]ではなく[MOPAC(1):]で行うと、**ジョブの設定**ウィンドウでの追加操作は必要ない。

注意点 2：ファイルモードでオープンソース版 MOPAC を使って計算する場合、まず **MOPAC Keyword Setup** で各種条件を設定後 **OK** をクリックする。次に **QM | MOPAC | (3)MOPAC 実行** をクリックしてファイル名を付けて入力ファイルを保存し、計算実行をする。



注意点 3: オープンソース版 MOPAC は並列化されており、デフォルトでは使用マシンの搭載 CPU コア数と同じ値が並列数になる。並列数を変えたい場合は、**MOPAC Keyword Setup** ウィンドウの **Others** 欄に「THREADS= (並列数)」を記入する。



以上