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

Ţ	MOPAC2016™	
Home		
Background	What's new in MOPAC2016™ ?	
Downloads		
Support	mothaczulia in its the successor to MOPAC2012A in and has improved methods for modeling large biomolecules.	
Developers	MOPAC2016Å [™] is a semiempirical quantum chemistry software package for the prediction of chemical properties and modeling of chemical reactions. It is	
Contact us	used by chemists and biochemists for both research and teaching, and runs on Windows [®] , Linux, and Macintosh platforms.	

1.2) 「Downloads」をクリックすると次の画面が表示される。



1.3) 「Download WOTAC for Windows (minimal zip file if Qt installer has problems)」 セノリリノ 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 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。

Editor:	notepad	 GAMESS(1):	C:¥Users¥Public¥gamess-64¥games	Ŀ
Jmol:	C:¥jmol-11.5¥jmol.bat	 GAMESS(2):	C:¥ff820_windows¥Firefly820.exe	ŀ
Mercury:	C:¥Program Files¥CCDC¥Mercury 1.	 Gaussian:	C:¥G16W¥g16.exe	ŀ
POV-Ray:	C:¥Program Files¥POV-Ray¥v3.7¥bi	 NWChem:	%CYGWINDIR%¥opt_win¥NWChen	ŀ
OpenSCAD:	C:¥Program Files¥OpenSCAD¥open:	 Cygwin:	C:¥cygwin_wm	ŀ
VMD:	C:¥Program Files (x86)¥University c	 LAMMPS:	%CYGWINDIR%¥opt_win¥LAMMPS	ŀ
Cube Viewer:	: C:¥Program Files¥VESTA-win64¥VES	 MPICH2:	C:¥Program Files¥MPICH2¥bin¥mpie	ŀ
MOPAC(1):	C:¥winmos11¥wm_system¥bin¥mop	 Quantum ESPRESSO:	%CYGWINDIR%¥opt_win¥Quantun	ŀ
MOPAC(2):	C:¥winmos11¥wm_system¥bin¥mop	 FDMNES:	C:¥Users¥ishim¥Downloads¥fdmnes	ŀ
MOPAC(3):	C:¥Program Files¥mopac-23.1.1-wir			

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。

プロジェ 日 #	レクトモード 新規プロジェクト (3)次元構造 新規プロジェクト (構造式を入 新観プロジェクト (株通式を入	チュートリアル&マニュアル E 入力) プリ ユーザマニュアル	》 》 表示	アニメーション キーワード 座標 訳式 O XYZ マス マ
Ŀ	新規プロジェクト (ファイルをイン)	к		LIEM X
뒖 新規プ	ロジェクト		-	
プロジェクト	名	mopac_test		
場所	○ 任意のフォルダ	C:¥winmos11¥UserData	~	参照
	○最後に開いたフォルダ	C:¥winmos11¥UserData		
	O UserDataフォルダ	C:¥winmos11¥UserData¥		
	◯ Users¥Publicフォルダ	C:¥Users¥Public¥		
説明(任意	0			
			保存	キャンセル

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。

チュートリ	リアル(U) ウィン	ンドウ(W) ^	ルプ(H)	
î 🖪	УЛЛК МО	PAC 🧲		
	Replace	🗳 🧉	6	
	一時ファイル	(temp.wmm))	-

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。			
🞯 ジョブの設定		_	×
●このマシンでジョブを実行			
プログラム	MOPAC (3)		
パス	C:¥Program Files¥mopac-23.1.1-win¥bin¥mopa	c.exe	

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。

≽	プロジェクト					
作講	ミフォルダ (mopac_test)	Options V				
	名前	状態				
0	work1_MOP_OPT	END				
アクション (work1_MOP_OPT)						
8	Coordinate (Initial)					
Coordinate (Final)						
Log Com						
Log (Archive)						
4	MO & Charge					
	Show in Explorer					

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 (DOL): 10.5281/zenodo.6511958 **
** Visit the DUI location for information on how to cite this program. **

AM1 CALCULATION RESULTS
<pre>************************************</pre>

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。

MOPAC H	Keyword Setup			_		\times
Easy Set	up					
Hamiltonian	PM7 ~	Method	EF ~			
Charge	~	Mult.	~	OPEN	~	~
ММ	MMOK ~	GNORM	0.05 ~	LARGE		~
GRAPH	GRAPHF 🗸	EXTERNAL	~			
STEP	~	POINT	~	т		~
STEP 1	~ 2 ~	POINT1	~ 2 ~			
🗆 AUX	ALLVECS	BONDS	ENPART	ESP		
	GEO-OK		NOINTER			
OLDFPC	POLAR	🕑 PRECISE		(
	VECTORS	□ XYZ				
Comment						
Others	THREADS=4					
	Winmostar					
Coordinate format XYZ ~						
Save as Default						
Reset	Import E	xport	ОК	Cancel	Run Ru	n