

[概要]

これは第一原理分子軌道法（非経験的分子軌道法）と密度汎関数理論のプログラムです。具体的には、Hartree-Fock 理論、2 次の Møller-Plesset 摂動、Kohn-Sham 法が実装されています。

[インストール]

お使いの mac が Apple Silicon M シリーズの SoC 搭載である事を確認してください。intel CPU 搭載の mac には別に配布ファイルがあります。Zip ファイルをダウンロードすると自動的に展開され Quantum_Chemistry という名のフォルダが出来ていると思います。このフォルダごと好きな場所へ移動してください。その中で作業をするので、アプリケーション・フォルダではなく、自分のホームの下が良いと思います。Quantum_Chemistry の中のフォルダの名前や相対位置は変更しないでください。変更すると動作しなくなります。

この段階で Bin フォルダの中にある計算プログラム (*.exe) は利用可能です。ターミナルで Bin に移動し、例えば「./H2O.exe 引数」の様に実行できます。引数に関しては、プログラムを引数なしで実行すると usage が表示されます。しかし、これらの計算プログラムを直に使うよりも、以下で説明する GUI フロントエンドを使った方が手軽です。

Gui フォルダの中にある quantum.exe と editor.exe がフロントエンド本体です。このフロントエンドの動作には GTK+3 と VTE3 と adwaita-icon-theme が必要です。この中に、ご自身の mac にインストールされていないものがあったら、全てインストールして下さい。パッケージマネージャは何でも良いです。これまでに利用しているものを使ってください。例えば、Homebrew だったら、ターミナルで「brew install vte3」等と実行します。

Run フォルダの中にはこれらのフロントエンドを起動するシェルスクリプト 01_Quantum.sh と 02_Editor.sh があるので、通常、フロントエンドの起動は Run フォルダに移ってスクリプトを実行します。スクリプトはターミナルから実行できますが、Finder でのダブルクリックで実行したい場合は、右クリックの「情報を見る」を開き、「このアプリケーションで開く」の項目を「ターミナル」にします。既になっているかも知れませんが、なっていない場合は変更してください。「ターミナル」は「その他」の「すべてのアプリケーション」で表示される「ユーティリティ」の中にあります。以上でインストールは完了です。

[アンインストール]

フォルダ Quantum_Chemistry を消去してください。それで終わりです。

[使い方]、[注意]、[任意の分子]、[履歴]

Windows と同じなので Windows 向けの README ファイルを参照してください。