

演 題	3D分子モデル作成ソフト Facio の開発	
発 表 者 (所 属)	末永正彦 (九州大学理学研究院化学部門)	
連 絡 先	〒812-8581 福岡県福岡市東区箱崎 6-10-1 九州大学理学研究院化学部門 e-mail: alohascc@mbox.nc.kyushu-u.ac.jp	
キ ー ワ ー ド	分子モデリング、計算化学	
開 発 意 図 適 用 分 野 期 待 効 果 特 徴 な ど	Facio は、OpenGL による 3D グラフィックスを使った分子モデリングソフトである。モデリングに必要な構造最適化は、外部プログラムである PC-GAMESS と連携して行っている他、分子軌道の表示や基準振動のアニメ表示も実装している。	
環 境	適 応 機 種 名	PC/AT 互換機
	O S 名	Windows 98, Me
	ソ ー ス 言 語	Delphi 6
	周 辺 機 器	
流 通 形 態 (右 の い ず れ か に を つ け て く だ さ い)	<ul style="list-style-type: none"> ・日本コンピュータ化学会の無償利用ソフトとする ・独自に頒布する ・ソフトハウス、出版社等から市販 ・ソフトの頒布は行なわない ・その他 	具 体 的 方 法
		<p>筆者のホームページより、実行ファイルを含む圧縮アーカイブが無償でダウンロードできる。</p> <p>http://hb6.seikyoku.ne.jp/home/zzzfelis</p>

1. はじめに

分子モデリングソフトや分子構造表示ソフトは、既に市販のソフトやフリーウェアがいくつかあるが、「グラフィックスの質」や「モデリングの機能」を独自に更に追究するため、自作することにした。この種のアプリケーションにおいて、グラフィックスの質を高めることは特に重要である。これは、有機化学の初学者が分子の立体構造を勉強する際、できるだけリアルな三次元のモデルとして見ることであれば、その立体構造をより把握しやすくなるであろうと考えるからである。そのため、OpenGL をグラフィックスエンジンに採用した。モデリングの機能に関しては、複雑な分子の組み立てに必要と思われる新しい機能を実装するとともに、外部プログラムである PC-GAMESS と連携することにより分子軌道法による構造最適化の機能を組み込んだシステムにした。モデリング機能に関しては、ほぼ完成したので、今後は、GAMESS の入力ファイル作成機能や計算結果の表示を更に充実させるなどプリポストプロセッサとしての機能強化し、フリーの計算化学統合環境を作っていきたい。

2. モデリング機能の概要

Facioでは、PDB (Protein Data Bank) 形式の分子構造データを内部で編集している。モデリングは、まず適当な分子を PDB 形式のデータで読み込むことから始まり、目的の分子を構築していく。置換基の導入は、水素原子をメチル基等で置換するやり方で行っている。原子の種類の変更、結合の生成・削除、結合長・結合角・二面角の変更などの基本的な操作のほか、次のような機能が実装されている。

- (a) 二つの PDB 形式の分子構造データの読み込み、一つの PDB ファイルにマージする。この際、後から読み込んだ分子の相対位置や角度を微調整することができる。またそれぞれの分子の任意の結合を直線上に並べることができる。この一連の操作に続けて、原子の削除と結合の形成を行うことにより Facio では全ての PDB 形式の分子構造を「置換基」として扱うことができる。この機能により、巨大な分子のモデルを作る際、小さなブロックに分けて作りそれをつなぐ方法がとれる。
- (b) GAMESS を起動し、構造最適化を行うことができる。
得られた構造は、計算終了後、直ちに分子モデルに反映される。
- (c) 結合 A - B があつたとき、A もしくは B のグループ全体を結合長の変化に応じて結合軸に沿って移動することができる。同様に、結合軸の周りに A もしくは B のグループ全体を回転させることができる。また、結合 A - B - C があつたとき、A もしくは C のグループ全体を結合角 ABC の変化に応じて移動させることができる。

3. 表示機能の概要

Facio にはモデリングの機能以外に、下記のような表示機能がある。

- (a) タンパク質、核酸の PDB ファイルを読み込み、その構造を表示する。二次構造、四次構造のデータがある場合には、それらを色分け表示する。
- (b) 外部プログラムである MSMS により計算した溶媒排除表面を小さな玉で表示する。(Fig.1)
- (c) GAMESS により得られる分子の基準振動をアニメーションで表示する。
- (d) GAMESS により得られる分子軌道を 3D で表示する。(Fig.2)

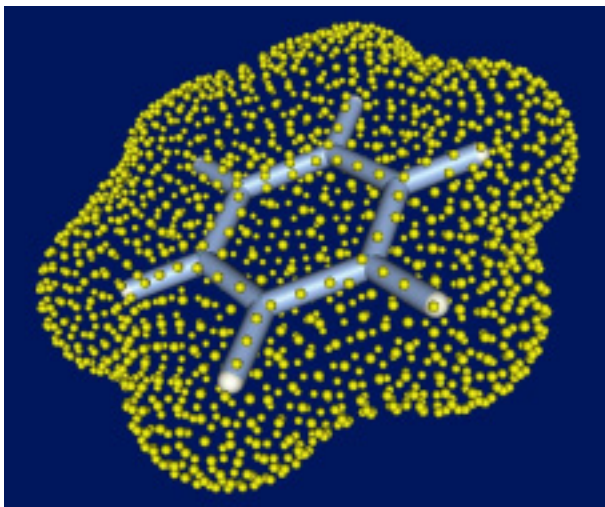


Fig.1 ベンゼンの溶媒排除表面

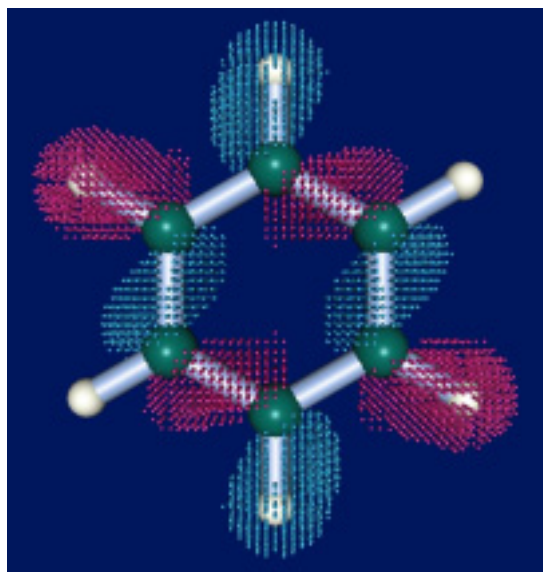


Fig.2 ベンゼンの分子軌道