

演 題	PC GAMESS を中心にした計算化学統合環境Facioの開発	
発 表 者 (所 属)	○ 末永正彦 (九大理院)	
連 絡 先	〒812-8581 福岡市東区箱崎 6・1 0・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	PC GAMESS、計算化学、分子モデリング、OpenGL	
開発意図 適用分野 期待効果 特徴など	フリーの分子軌道計算ソフトである PC GAMESS を使い易くするための GUI 統合環境として、分子のモデリング、入力ファイルの作成支援および計算結果の可視化を行うソフトを開発した。	
環 境	適 応 機 種 名	PC/AT 互換機
	O S 名	Windows 98SE, Me, NT, 2000, XP
	ソース言語	Delphi 6
	周 辺 機 器	なし
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 ・未定 	具体的方法
		<p>著者のホームページより、配布アーカイブが無償でダウンロードできる。</p> <p>http://hb6.seikyou.ne.jp/home/zzzfelis/ または http://www1.bbq.jp/zzzfelis/ 2005年4月以降は2番目のサイトのみ。</p>

1. はじめに

近年、商用の計算化学統合環境の価格が高くなってきたため、教育用としてまとまった数を導入しようとする場合、財政的な理由で困難なことがある。この問題を解決するため、フリーの分子軌道プログラムである PC GAMESS を中心にしたフリーな計算化学環境の整備を思い立った。この PC GAMESS を中心にした計算化学の現状は次のように概観される。フリーのプリプロセッサとしては既に Molda、Dmostar 等があり、モデリングと連携した基本的な入力ファイルの作成ができる。計算結果の可視化に関しては、Molekel 等があり、精緻な描画が可能であるが、例えば CUBE データの可視化ができないなど、実装すべき機能がまだある。即ち PC GAMESS を中心にしたフリーの環境において必要な機能はほぼ揃っていると言えるが、その全てを一つのソフトで行う環境は整っていない。統合化を既存のソフトと連携する形で行うのも一つの方法ではあるが、必要な機能の追加や改良については、連携するソフトに依存するため自由が利かない。従ってモデリング、入力ファイル作成支援、可視化機能を全て自前で作成する形で統合化することが、より柔軟で発展性のあるシステムの構築に不可欠である。

2. 統合環境の概要

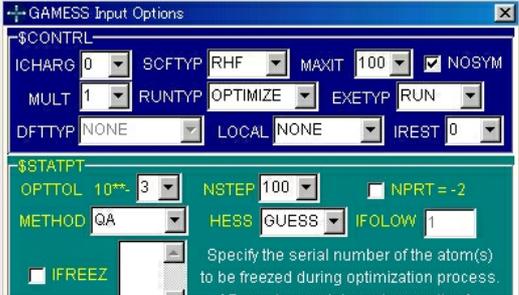
PC GAMESS を中心にした計算化学統合環境 Facio は以下のような特徴がある。



分子モデリング

- (1) OpenGL による 3D グラフィックス
- (2) GAMESS の構造最適化と連携したモデリング
- (3) 二つの分子の読み込みと相対位置の微調整。
それに続く二つの分子の結合。これにより、巨大で複雑な分子を小さなブロックに分けてモデリングすることができる。

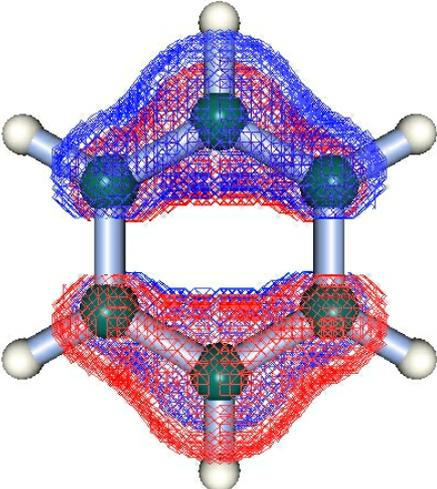
入力ファイルの作成支援



入力オプションの設定では GUI を介して構造最適化、一点エネルギー計算、遷移状態の最適化、Hessian、ラマン強度、IRC 計算および PC GAMESS 4.3 以降の機能である DFT 計算をサポートしている。また CUBE の作成を HOMO-LUMO を基準にした相対値の指定でできるように改良した。



計算結果の可視化



- (1) 分子軌道、静電ポテンシャル、全電子密度のメッシュ表示。分子軌道に関しては、半経験的分子軌道および MINI、STO-3G の軌道の係数をもとに計算して表示するものと、ab initio 計算の CUBE データを可視化する 2 種類の方法を実装している。
- (2) 基準振動のアニメーション表示
- (3) 赤外・Raman スペクトルのシミュレーション
- (4) IRC 計算で得られる一連の構造の連続表示