

計算化学統合環境 Facio の開発

末永 正彦

九州大学理学研究院化学部門 〒812-8581 福岡市東区箱崎 6-10-1

【緒言】

商用の分子モデリング・可視化ソフトの価格は比較的高いため、大学で演習用としてあるまとまった数を揃えようとする場合や個人で購入しようとする場合、経済的な理由で困難なことがある。また、商用のソフトであっても操作に不合理な部分があったり、必要な機能がなかったり、グラフィックスの質がいま一つであったりする。これらの問題を解決するためフリーの分子軌道法プログラムである PC GAMESS を中心にした計算化学統合環境 Facio を開発してきた。開発にあたっては、「完全にフリーなソフトウェアで尚且つ商用のソフトを越えるもの」を目標とし、これまでに、OpenGL による 3D グラフィックスを使った分子モデルの表示、対話的なモデルの構築、分子力学計算ソフトの TINKER と連携したペプチドや核酸のモデリングおよび MM3 計算の自動化、PC GAMESS の計算で得られる分子軌道、静電ポテンシャル、電子密度、赤外・ラマンスペクトルのシミュレーションなどの可視化や基準振動のアニメーション表示、溶媒排除表面への静電ポテンシャルのマッピングを行うことのできるソフトを作ることができた。また、PC GAMESS のみならず、WinGauss や Gaussian に対するインターフェイスも同様に完備することができた。

今回は、昨年の年会以降実装した以下のような機能について報告する。

【結果】

(1) Linux 対応

Windows アプリケーションを Linux 上で実行させるためのソフトウェア WINE と OpenGL 互換性のあるグラフィックスライブラリ Mesa を使うことにより、Facio の Windows 版実行ファイルを Linux 上で動かすことができ、Linux 版の PC GAMESS、Tinker、MSMS との連携も、Windows と全く同じ操作でできるようにした。テストに用いた Linux は、Fedora Core 4 と Scientific Linux である。外部プログラムと連携する場合、プログラミング上の注意点として次のことがわかった。計算が終了した後に続けて計算結果を読み込み、分子モデルに反映させる場合、WINE の環境では「計算が終了する前に計算結果を読み込みようとする」ことが起こる。この点に注意してプログラミングしないと連携が失敗する。

Linux 上での動作が確認できたので、UTChem 用の入力ファイルを作成し計算を開始させるための GUI を作成した。UTChem とは、東大の平尾研究室で開発されている分子理論計算プログラムパッケージであり、Linux 上で利用できる。

(2) Gaussian による MD 計算の可視化

Gaussian の ADMP、BOMD による MD 計算の Trajectory を可視化し、構造変化に合わせて核の運動エネルギー、電子の運動エネルギー、ポテンシャルエネルギー、全エネルギーの変化を Fig. 1 のようなグラフで表示する機能を実装した。Trajectory の時間軸に沿った構造変化のアニメーションも表示でき、その際、グラフ上の対応する点も連動して示される。

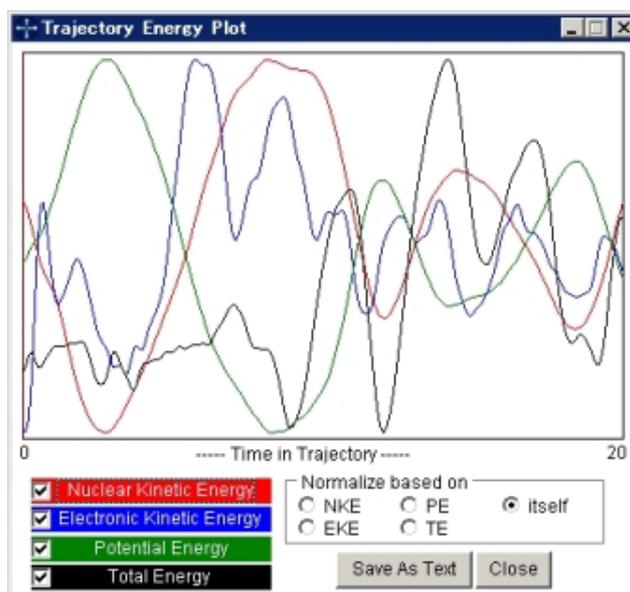


Fig. 1 Trajectory の時間軸に沿った各種エネルギーの変化

(3) NMR に関する計算結果の読み込み

Facio ユーザーのリクエストに応え、NMR 計算に関する次の二つの機能を付けた。一つは、Gaussian による NMR スピン スピン結合の計算結果から H-H 結合定数のみを抽出し、化学シフトと共にテキストファイルとして保存する機能で、もう一つは、WinGauss および Gaussian による GIAO 遮蔽テンソルを読み込み、TMS に対する相対値として化学シフトを表にする機能である。

(4) MO の任意の断面の等高線表示

PC GAMESS および Gaussian の Cube 形式の分子軌道の任意の断面を gnuplot と連携して等高線で表示する機能を実装した。(Fig. 2)

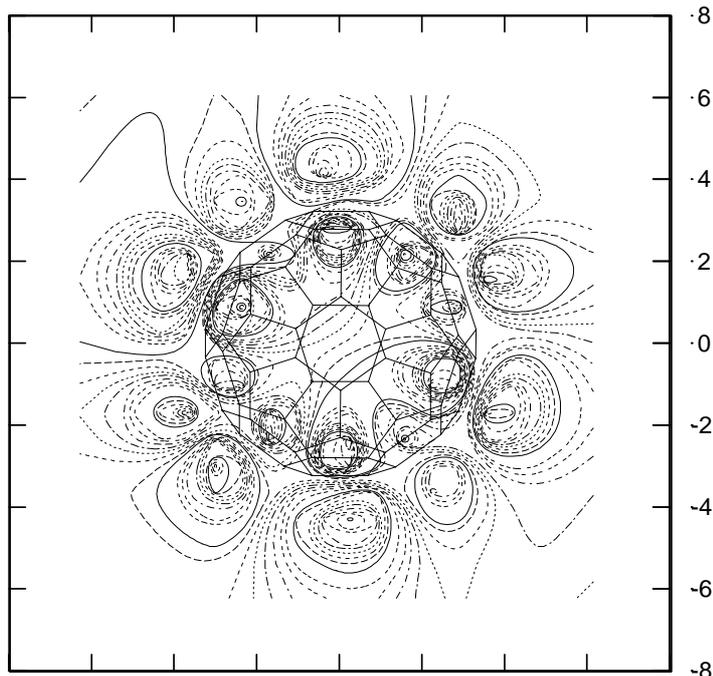


Fig. 2 C₆₀ の LUMO の断面図

(5) 構造が少しだけ異なる 2 つの分子の比較

Facio ユーザーのリクエストに応え、構造が少し違う 2 つの分子を比較して結合長、結合角、二面角の差をリストにして出力する機能を付けた。比較のために分子をある特定の方向に向ける機能が必要であったため、分子の慣性テンソルの主軸変換機能も実装した。

(6) 分子軌道のエネルギー準位の模式表示

分子軌道のエネルギー準位を模式的に表示する機能に改良を加え、表示する領域を指定することで、エネルギー準位が込み合っている場合でも見やすいようにした。(Fig. 3)

参考文献

M. Suenaga, *J. Comput. Chem. Jpn.*, Vol. 4, No. 1 pp.25-32 (2005).

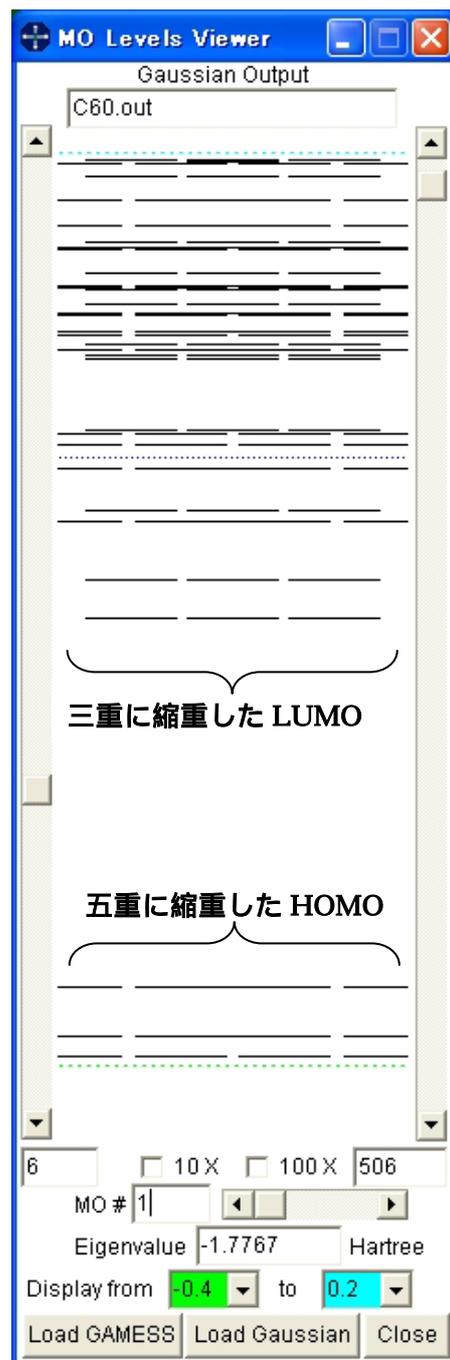


Fig. 3 C₆₀ の分子軌道のエネルギー準位