

## 分子モデリングと計算化学のための可視化ツール Facio の開発

○末永 正彦

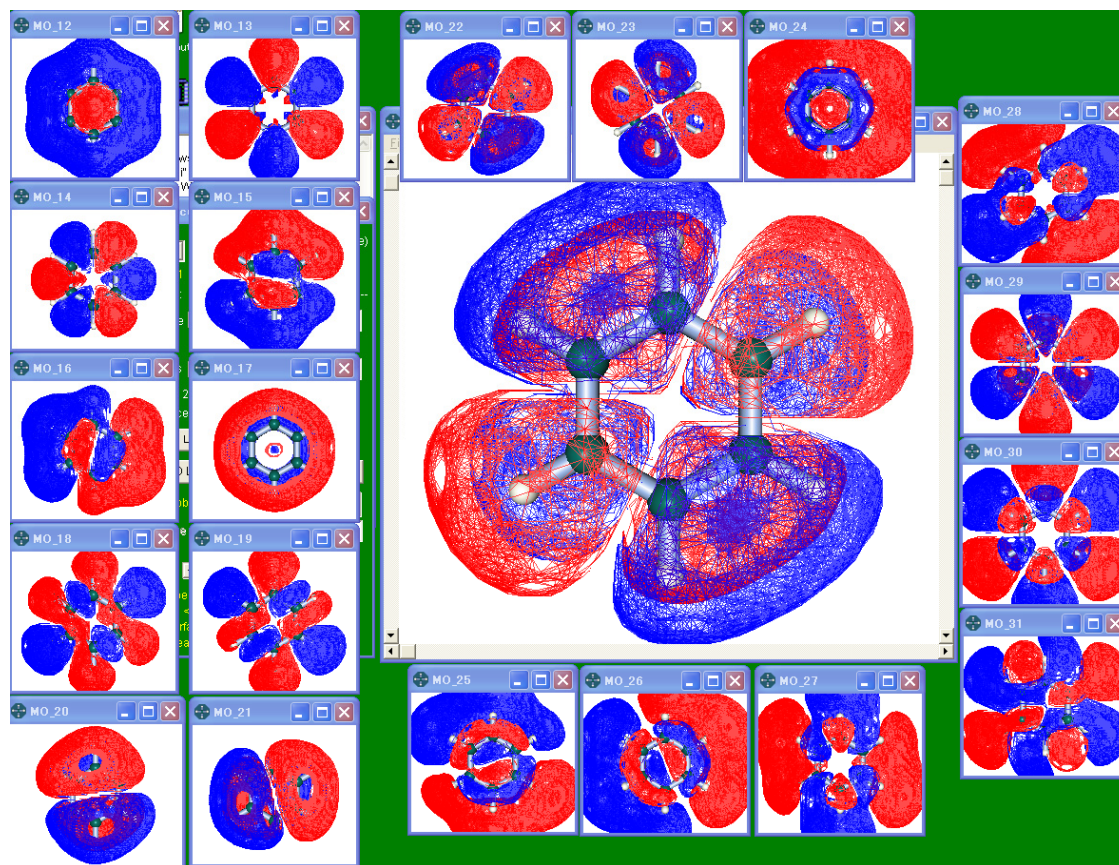
九州大学理学研究院化学部門（〒812-8581 福岡市東区箱崎 6-10-1）

## 【緒言】

OpenGL をグラフィックスエンジンとして、対話的な分子モデルの構築、PC GAMESS, Gaussian, WinGamess, Tinker のための入力ファイルの作成および計算結果の可視化を行なうソフトウェア Facio をこれまで開発してきた。今回は、昨年の年会以降に実装した以下のような機能について報告する。

## 【結果】

## (1) MOのマルチ画面表示



Gaussian もしくは PC GAMESS の Cube MO ファイルを最大 20 個まで一度に読み込み、マルチ画面で表示する。サブ画面での分子の配向は、メイン画面での配向と常に同じになるようになっているため、同時にたくさんの MO を正確に同じ方向から見て比較することができる。各 MO の画像をビットマップもしくは PNG ファイルとして連続的に保存する機能もある。

## (2) Gaussian Cube MO の作成と読み込みのための新機能

MO の範囲を指定するだけで、MO の番号をファイル名に含めた一連の Cube MO ファイルを連続的に出力する機能を作った。これにより、各 MO をそれぞれ別の Cube ファイルとして保存するのが容易になった。また、このようにして作成した Cube MO ファイルは、ドラッグ&ドロップにより一旦リストに登録してから一度に読み込んで上述のマルチ画面で表示することができる。

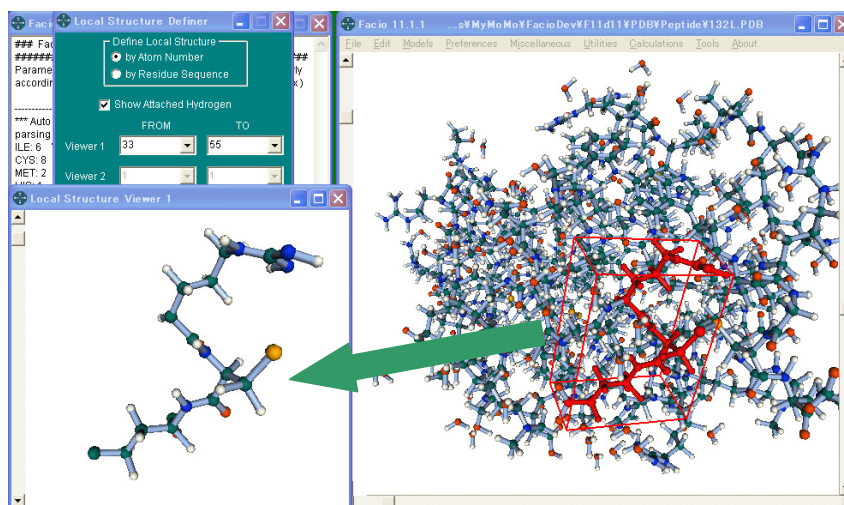
### (3) GAMESS の起動を簡単にするドラッグ&ドロップユーティリティ

PC GAMESS および WinGamess の入力ファイルをドラッグ&ドロップするだけで、計算を開始することのできるバッチユーティリティを開発した。これにより、Gamess の計算の開始が非常に簡単になる。最大 9 個までの入力ファイルを同時にドラッグ&ドロップすることができ、この場合には、計算が連続して行なわれる。ユーティリティには、PC GAMESS 用と WinGamess 用がある。(それぞれ PCG\_DDE.bat と WG\_DDE.bat)



### (4) 部分構造の表示と編集

タンパク質のような込み入った分子の部分構造を別画面で表示する機能を実装した。右図は、水素原子を補完した 132L.pdb の 33 番から 55 番までの原子とそれに結合している水素を表示したものである。部分構造を表示する画面は、4 つ用意されており、各画面上で、置換基の導入などの分子構造の編集が可能である。



(5) PC GAMESS / MRMP2 計算のための入力ファイルの自動作成  
CI および MCSCF の計算スピードを上げるための PC GAMESS 独自のオプションも自動的に付加される。

(6) PC GAMESS PES Scan 用の GUI  
2 変数に対応したポテンシャルエネルギー面の走査のための設定を補助する。計算結果であるエネルギープロファイルおよび各点に相当する構造を対応させて表示することができる。

(7) 水素結合の自動検出と表示  
検出は、構造データファイルや GAMESS、Gaussian などの出力を読み込む際に自動的に行われる。水素結合に関与している原子の種類、通し番号、水素結合距離および角度のリストも出力できる。

(8) マルチディスプレイの実装  
ドラッグ&ドロップにより最大 10 個のファイルを同時に読み込み、それぞれ別のウィンドウに表示する機能で、読み込み可能なファイル形式は、PDB, CCI, 自由形式もしくは WebLab の XYZ, MDL mol, Tripos mol2, TINKER XYZ, GAMESS および Gaussian の出力ファイルの 8 種類である。読み込みの際にはファイルの種類が混在していても構わない。

(9) WinGamess/Tinker (MM3) SIMOMM 計算用の GUI  
ユーザーがしなければならないのはディスプレイ上の原子をクリックして High レイヤーを設定することだけで、MM3 の原子タイプの設定や SIMOMM 計算に必要な設定などは、自動的に作成される。