

分子軌道計算の視覚化

— 量子化学計算支援プログラム群

理工学部 物質理工学科 宮本 量

rmiya@cc.hirosaki-u.ac.jp

1 はじめに

“化学”というと、ビーカーやフラスコを手に実験・研究を進めるというイメージが、一般にも、また化学者の多くにもあることでしょう。しかし近年計算機の中で実験をする、すなわち化合物の性質を計算により求めることがたやすく行えるようになってきました。これはコンピュータの能力の向上と、さまざまなプログラムパッケージの整備・普及のためでしょう。むかしは専門家しかできなかつた分子科学計算も、最近では実験化学者が実験結果の理解を深めるために容易に利用できるようになっています。

そのために広く利用されているのは分子軌道法や分子力場の様な分子科学計算で、代表的なプログラムには Gaussian94, MOPAC, MM2 などがあります。これらのいくつかは弘前大学でも導入・利用されています。しかしこれらのプログラムの計算結果は膨大な数値データとしてファイルに出力されるので、初心者がそこから必要な情報を読みとるなど分子について理解するのは困難です。そこでこれらの計算結果を図示して視覚的に把握するためのプログラムも多数開発されています。ここでは UNIX / X Window System 上で利用できる以下のソフトウェアを紹介します。

- babel — データファイルのフォーマット変換
- molden — 分子軌道や電子密度の表示
- pluton — 分子構造の 3D 表示 (線画)
- rasmol — 分子構造の 3D 表示 (グラフィック)

これらのプログラムはいずれも hakkoda にインストールされており、プログラム毎にまとめて /usr/local/ 以下のサブディレクトリにあります。以下の操作例では、コマンド名をフルパスで指定していますが、エイリアスやパスを通しておくと良いでしょう。

2 Babel

バベルと聞いてすぐに思い出されるのは、旧訳聖書のバベルの塔でしょう。天に届くような塔を建設しようとしたところ、神の怒りにふれて地上の言葉が乱れ、人々の互いのコミュニケーションが困難になったというエピソードに登場します。

分子科学の多くのプログラムでは、分子構造のデータ (原子の座標) を入力する必要があるのですが、そのデータの形式はプログラム毎にそれぞれ独自なものであって、どんな形式でも良いというわけにはいきません。そこでこれらの形式を互いに変換するためのツールが `babel` で、旧訳聖書のエピソードとは逆に、情報の相互変換の役に立ってくれます [1]。

まず環境変数 `BABEL_DIR` を設定する必要があります。C-shell ならば次のようにします。

```
setenv BABEL_DIR /usr/local/babel-1.1
```

さて `babel` が取り扱う事ができる形式は非常にたくさんありますが、基本的な使い方としては、入力と出力の形式を指定すればよいのです。

```
babel [-v] -i<input-type> <name_1> -o<output-type> <name_2>
```

たとえば、Brookhaven Protein Data Bank の形式を Gaussian94 の内部座標系 (Z-matrix) による入力データの形式に変換したければ、

```
/usr/local/babel-1.1/babel -ip inputfile -og outputfile
```

とすれば変換されたファイル `outputfile` ができあがりです。あとはここに必要なキーワードを加えれば、そのまま分子軌道計算プログラム Gaussian94 の入力データファイルとして使用できます。

ドキュメントファイルは `/usr/local/babel-1.1/README.1ST` ですが、`babel` で扱えるデータ形式は、

```
/usr/local/babel-1.1/babel -help
```

とすることで表示されます。

3 Molden

`molden` は分子軌道計算プログラム Gaussian94 の出力ファイル `file.out` や GAMESS のログファイル `file.log` を読み込んで、電子密度や分子軌道の形を描画・表示するプログラムです [2]。操作は X-Window 上で対話的におこなうことができるので、非常に使いやすいプログラムです。環境変数 `DISPLAY` に自分の端末の IP アドレスを設定してからプログラムを起動します。例えば C-shell を用いていて自分の端末の IP アドレスが 133.60.104.32 なら、次のようにします。

```
setenv DISPLAY 133.60.104.32:0.0
/usr/local/molden3.2/molden
```

すると分子を表示するおおきな窓とコントロールパネルの小さな窓が開きます。コントロールパネルの Read File ボタンをマウスでクリックすればカレントディレクトリのファイル一覧が表示されるので、分子軌道計算プログラムの出力ファイルを指定します。このファイルは、起動時の引数として指定することもできます。`molden` を起動した状態では Molecular Mode の状態で、3D で表示された分子は Window をクリックすることで向きを変えることができ、すきな方向から分子を見ることができます。

さらに、基準振動解析の計算結果に基づき分子が振動するアニメーションを見ることもさえもできるというスグレモノです。また Density Mode のボタンをクリックすれば、分子軌道や電子密度を等高線で表示したり、図 1 のように立体的に表示することもできます。

これらの分子の構造や電子密度マップは Postscript ファイルとしての出力も可能です。その他の機能については、自分でいろいろと試してみるなり、ドキュメントファイル `/usr/local/molden3.2/README` を見てください。

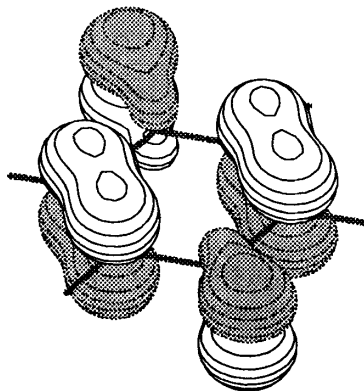


図 1: ベンゾキノンの HOMO. GAMESS の計算結果を用いて molden で作成.

4 Pluton

pluton は分子構造を表示するプログラムで、PDB 形式などの分子構造ファイルを入力として受け付けます [3]。それ以外の形式の分子構造データは、先の babel で形式を変換しておきます。プログラムの実行は、環境変数 DISPLAY に自分の端末の IP アドレスを設定してからプログラムを起動します。例えば C-shell を用いていて自分の端末の IP アドレスが 133.60.104.32 なら、次のようにします。

```
setenv DISPLAY 133.60.104.32:0.0
/usr/local/pluton/pluton
```

そして pluton のコマンドラインから命令を入力すると、それが分子構造の表示 window に反映されるしくみになっています。まず plot と入力すると分子を表示します。分子の向きを変えたり、wire frame、ball & stick、

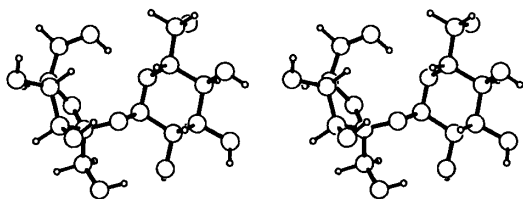


図 2: sucrose のステレオ図. pluton により作成.

CPK などのいろいろなモデルで分子の構造を表示することができ、またステレオ表示も可能です (図 2)。表示された絵は Postscript 形式のファイルに出力できます。

コマンドラインから命令を入力しなければならず、最近流行りの GUI ではないので、操作性の面ではやや不満があるかもしれません。しかしもともとプロッターにも出力できるプログラムなので、分子構造を線画で鮮やかに描写してくれます。カラー写真を使わない文書や OHP で分子構造を示すのに適しています。

使用方法については、on-line help が組み込まれているので、pluton のコマンドラインで

```
help <subject>
```

とすればわかります。また詳しくは、短いドキュメントファイル

`/usr/local/pluton/README` やマニュアル/`usr/local/pluton/pluton.doc` も見てください。

なおこのプログラムは、学術組織内で (研究の目的で) 使用し、再配布しないという条件でフリーですので注意してください。

5 Rasmol

分子の構造を表示するこの `rasmol` が、もっともコンピュータグラフィックスらしいものと言えるかもしれません [4]。このプログラムは小分子を `ball & stick` や `CPK` モデルで表示できるだけでなく、タンパク質などの高分子をリボンで表示することもできます (図 3)。

受け付けるデータ形式は、`PDB` 形式など数種に限られているので、それ以外の形式の分子構造データは、先の `babel` で形式を変換しておきます。Gaussian94 などであられた分子構造も、これにより表示させることができます。プログラムの実行は、環境変数 `RASMOLPATH` にプログラムやヘルプファイルのあるディレクトリを、`DISPLAY` に自分の端末の IP アドレスを、それぞれ設定してからプログラムを起動します。例えば `C-shell` を用いていて自分の端末の IP アドレスが `133.60.104.32` なら、次のようにします。

```
setenv RASMOLPATH /usr/local/RasMol2
setenv DISPLAY 133.60.104.32:0.0
/usr/local/RasMol2/rasmol datafile
```

これでプログラムが起動し、`datafile` の分子を表示します。表示された分子は、マウスで `window` をドラッグすることで自由に向きを変えて見ることができ、分子構造を立体的に把握することができます。また表示形式はマウスでプルダウンメニューから選択できます。また `rasmol` のコマンドラインからの命令により、いろいろな操作ができます。表示された絵はポストスクリプトを始めとするいくつかの形式でグラフィックデータとして保存できます。

`/usr/local/RasMol2/doc/` にテキスト形式のマニュアル (`rasmol.txt`) などがありますので、参照してください。



図 3: verotoxin の構造の ribbon 表示。
`rasmol` による。

6 さいごに

ここでは分子を視覚化することにより、量子化学計算を支援するプログラムのいくつかを簡単に紹介しました。これらはいずれも hakkoda にインストールされています。より詳しい使い方は、付属のドキュメントファイルを読むか、各自がプログラムを使いながら発見してください。

驚くべきことにここで紹介した各種のプログラムは anonymous FTP で入手することができ、また学術研究で利用するのであれば無料です。これらのプログラムを作成し、公開してくれたそれぞれの作者には深く感謝します。またこれらのプログラムを hakkoda にインストールするにあたって御協力いただきました総合情報処理センターの三上秀秋技官にも感謝します。

参考文献

- [1] Babel-1.1, <http://mercury.aichem.arizona.edu/babel.html>,
<ftp://joplin.biosci.arizona.edu/pub/Babel>
- [2] Molden-3.2, <http://www.caos.kun.nl/~schaft/molden/molden.html>,
<ftp://ftp.caos.kun.nl/pub/molden>
- [3] Pluton-92, <ftp://xraysoft.chem.ruu.nl/pub/dec5000/pluton>
- [4] Rasmol-2.5, <http://klaatu.oit.umass.edu/microbio/rasmol>,
<ftp://ftp.dcs.ed.ac.uk/pub/rasmol>