分子科学計算のための
分子構造データ作成支援プログラムの開発

弘前大学理工学部　宮本 量

rmiya@cc.hirosaki-u.ac.jp

概要

例えば分子軌道計算プログラム Gaussian94 などの様な、多くの分子科学に関するプログラムを利用する場合に、データとして分子の構造を入力しなければならない。しかし構造を内部座標で表現する Z-matrix の形式で分子を組み立てた場合に、研究者が意図した構造を表現できているのかどうか、慣れないとわかりにくい場合も多い。

そこで今回の開発研究では、入力した Z-matrix に基づいて構造を表示しつつ分子を組み立てることができるようにした、Z-matrix Editor “KUMI” を作成した。

1　序論

機能性材料や特異的な反応性を有する化合物の性質を理解するためには、その構成要素である原子分子のレベルで事象を解明する必要がある。そのためのアプローチのひとつとして、分子の電子状態を理論的に計算する種々の分子軌道や分子力場の方法が開発されている [1, 2]。これらの分子科学計算により、分子の幾何学的な構造や電子密度分布を始めとする種々の物性を求めることができる。そして得られた計算結果を 3 次元グラフィックスとして描画することにより、我々は分子の性質について視覚的にも理解することができる。

従来これらの計算は大型コンピュータを駆使して実行されていた。しかし最近のめざましいコンピュータの発展にともない、ワークステーション上にこの一連の流れをまとめて提供するような分子設計支援システムが数社から提供されるようになった [3, 4]。またパーソナルコンピュータのレベルでも、類似のことが可能になりつつある [5, 6]。これらのシステムでは効率良く目的の分子を組み立てるツールが備わっており、また糖類・タンパク質・核酸などのために特定の構成ユニットを仮定した “構造作成ツール” の様なものもある。

また化学の分野では立体的な分子の構造を把握するために球棒モデルや CPK モデルといった分子模型が使われてきた。早くからこれをパーソナルコンピュータ上で実現したソフトウェアとして Chem3D が有名である [7]。これらのソフトウェアは、直観的に分子を組み立てることができることを目的としており、その意味で非常に使いやすいものになっている。これらの分子モデリングソフトウェアはいずれも、構築した分子構造を種々の分子科学計算プログラムに渡せるようになっている。さらに Molda のような [8, 9]、そのための専用に作成された分子モデリングソフトウェアもある。

さて、分子科学の立場から言うと分子の性質を理解するにあたり分子の対称性は重要な概念である。そして分子軌道計算や分子力場計算の結果を理解するにあたって強力な武器になり得る。さらに対称性を用いて構造パラメータを減らすことで、分子科学計算における計算時間を大幅に節約することも可能である。このような対称性を考慮して分子を組み立てるには、Z-matrix を用い [10, 11, 12]、構造パラメータ (結合距離や結合角など) にラベルを使うことが非常に有効と考えられる。

しかし上記の分子モデリングソフトはいずれも、そこから生成される原子の座標データは、分子全体の対

称性や例えばメチル基などのような局所的な対称性について全く考慮されていない。また特定の結合軸まわりの回転障壁について議論したいと思っても、必ずしもそれに都合のよい内部座標の採り方になっていない。

このような場合には、個々の研究者が人間の頭で (紙と鉛筆を使って) 分子構造データを作成しなければならない。そして考えられた分子構造データが誤り無く意図した構造であるかどうかの検証には、簡単なオプションまたは専用のキーワードを設定して実際の分子科学計算を実行を試みるの場合が多いのが現状ではないかと推測される。

そこでこの Z-matrix による分子構造の組み立て/分子モデリングを支援し、分子科学計算の入力となりうる構造データを得るためのプログラムがあると、非常に有用であると考えられる。そこで本開発研究では、入力された分子構造のデータをリアルタイムで 3 次元グラフィック表示しながら、対話的に分子を組み立てることのできる、分子構造データ作成支援プログラム (Z-matrix Editor "KUMI") を作成した。またこのプログラムは広く UNIX の X Window System 上で動作できるように、移植性を高くすることにも配慮した。

2 設計と開発

Z-matrix Editor "KUMI" は以下の特徴を持つものとして設計した。

- Unix/X11 上で動作し、Motif ライブラリを用いたアプリケーションであるので、動作環境に対する制限がほとんどない。
- グラフィカルユーザインターフェース (GUI) を持ったマルチウィンドウ型のアプリケーションであるので、コンピュータの初心者にも利用が容易である。
- Z-matrix を入力して分子を組み立て、構造をグラフィック表示する。
- 構造パラメータにラベルを用いることができる。
- 表示されている分子を任意に回転・拡大縮小して、その構造を確認することができる。
- Z-matrix やラベルの変更を分子の立体構造に即時に反映して表示するので、入力データが意図した構造を表現しているのかどうかを、視覚的に確認しながら作業ができる。
- 作成した分子構造のデータは、分子科学計算プログラム Gaussian 94 および MOPAC の入力データ形式でファイルに出力できる [1, 2]。

プログラムの開発は Unix 系のオペレーティングシステムである FreeBSD と X Window System である XFree86 を搭載したパーソナルコンピュータ上で行なった [13, 14]。GUI のためのライブラリ/ウィジットセットには Motif を用いた [15, 16, 17, 18]。すべてのプログラムは C 言語で記述した [19]。

その後本プログラムは、そのソースコードに全く変更を加えること無しに、UP-UX/V(Rel4.2MP) と IRIX Release 5.2 のシステム上で [20, 21]、それぞれコンパイルおよび実行が可能であることを確認した。また Windows および MacOS 上の [22, 23] いくつかの X-server プログラムを用いて [25, 24] リモートホスト上の "KUMI" が利用可能であることを確認した。

3　ユーザー・インターフェース

実際に “KUMI” を使用している画面が図 1 である。

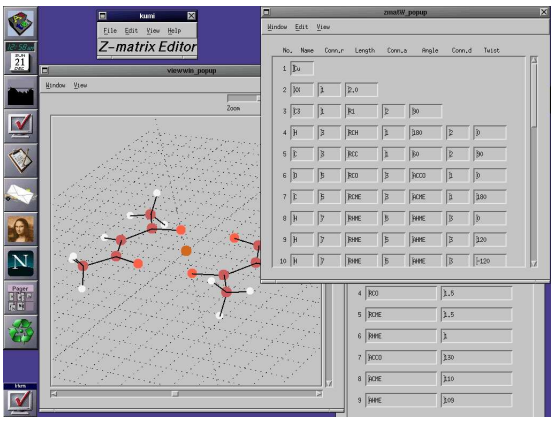

図 1: Screenshot of “KUMI” using through X11.

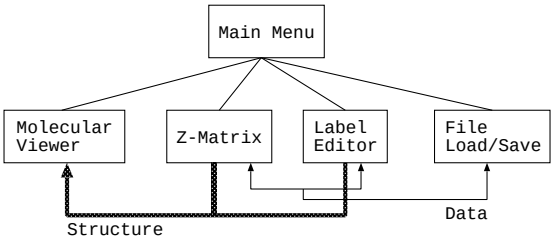

図 2: Structure of “KUMI”.

本プログラムは図 2 に示されるように、メインのウインドウから複数の子ウインドウを開いて、Z-matrix・ラベルなどを入力しまた分子を表示させる。

Z-matrix の入力ウインドウでは入力のための枠があらかじめ用意されており、順次数値やラベルを入力すれば良いようになっている。またラベルに数値をアサインするウインドウでは、ラベルと数値を組にして入力すれば良いように枠ができている。これらの数値を入力する枠は Gaussian94 の形式なので、Gaussian を使ったことがある場合には非常にわかりやすい。さらに Z-matrix 中で用いられているラベルは、定義済みであれば即座に参照/修正でき、未定義であれば数値の入力を促す機能がある。

4　アルゴリズム

4.1　Z-matrix から直交座標系への座標変換

各原子の座標は次のようにしてデカルト座標系に変換する。まず一番目の原子は原点に置く。二番目の原子は z 軸上 ($z > 0$) に置く。三番目の原子は xz 平面上 ($x > 0$) に置く。四番目以降の原子は、すでに与えられている原子三個を基準に決定する。

ここで Z-matrix は図 3 に示すように、結合距離 r ・結合角 θ ・二面角 ϕ を用いて原子の相対的な位置 (座標) を指定する方法である。しかしこれは基準になる原子がそれぞれ原点 (原子-1)・z 軸上 (原子-2)・xz 面内 (原子-3) にあるとした場合に、極座標系で位置を指定することと等価である (図 4)。そこで本プログラムでは、図 4 および式 (1) で求められる変位ベクトル $\mathbf{v_{1n}}$ を、式 (2) のオイラー角 [26] であらわされる回転変換 $\mathbf{R}$ で向きをあわせてから、基準の原子-1 の位置 $\mathbf{r_1}$ まで平行移動することで (式 (3))、4 番目以降 (n 番目) の原子の座標 $\mathbf{r_n}$ を得た。

$$\mathbf{v_{1n}} = \begin{pmatrix} \sin\theta\cos\phi \\ \sin\theta\sin\phi \\ \cos\theta \end{pmatrix} \tag{1}$$

$$\mathbf{R} = \begin{pmatrix} \cos\gamma\cos\beta\cos\alpha - \sin\gamma\sin\alpha & -\sin\gamma\cos\beta\cos\alpha - \cos\gamma\sin\alpha & \sin\beta\cos\alpha \\ \cos\gamma\cos\beta\sin\alpha + \sin\gamma\cos\alpha & -\sin\gamma\cos\beta\sin\alpha + \cos\gamma\cos\alpha & \sin\beta\sin\alpha \\ -\cos\gamma\sin\beta & \sin\gamma\sin\beta & \cos\beta \end{pmatrix} \tag{2}$$

$$\mathbf{r_n} = \mathbf{R} \cdot \mathbf{v_{1n}} + \mathbf{r_1} \tag{3}$$

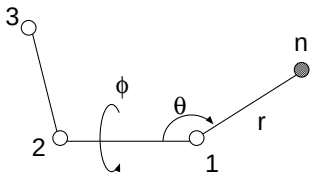

図 3: Definition of Z-matrix.

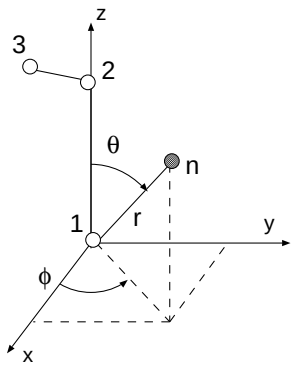

図 4: Polar coordinate.

4.2 直交座標系からスクリーン座標系への座標変換

3 次元空間での各原子の座標 $\mathbf{r}$ が求まったら、それを図 5 および式 (4) に示されるように透視変換してスクリーン上の座標 $\mathbf{r}'$ を求めた [27]。原子は奥から順に描画して手前の原子で塗り潰し、特別な処理による隠線・隠面消去は行っていない。

$$\begin{aligned} x' &= \frac{h_2 - h_1}{h_2 - z} x \\ y' &= \frac{h_2 - h_1}{h_2 - z} y \\ z' &= h_1 - z \end{aligned} \tag{4}$$

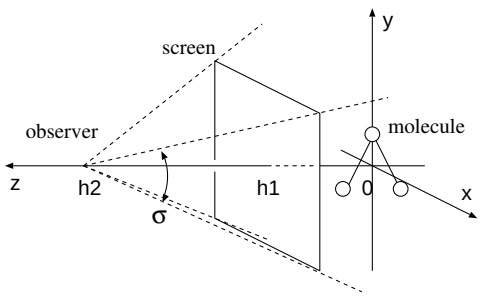

図 5: Projention of molecule onto the screen.

また原子間に化学結合がある場合にはそれを実線で示したが、これは各原子の van der Waals 半径・共有結合半径・金属結合半径などから結合の有無を判断した [28]。

4.3　分子の回転とズームによる視点の変化

本プログラムでは、組み立てた分子を任意の方向から見ることができるようにした。そのためには 3 次元空間での視点の移動と向きの変更が必要になる (図 6)。しかしここでは視点の移動の代わりに、対象となる分子を x 軸・y 軸・z 軸のまわりに回転させた (図 7)。

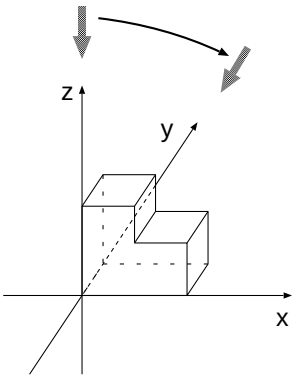

図 6: Changing in viewpoint.

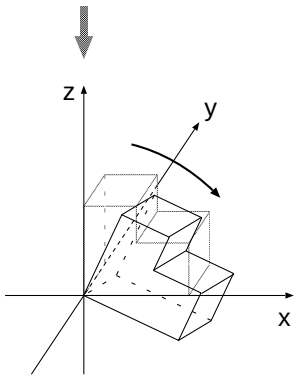

図 7: Rotation of object.

分子の拡大・縮小表示にはオブジェクトのスケーリングではなく、表示エリアの拡大・縮小で対応した。

5　まとめと将来への課題

本研究では分子をグラフィカルに表示しながらインタラクティブに Z-matrix を入力して分子を構築するツールを開発した。本プログラムは一般的な Unix/X11 システム上で動作する。これにより Gaussian94 などの分子科学計算プログラムの入力データを容易に作成できるようになった。

一方、本プログラムは一般に普及している分字構造表示プログラムに比べて以下の点で劣っていると思われる。

- 球棒モデルや CPK モデルなどのような現実の分子模型のような形での表示ができない
- 陰影をつけるなどして立体感のあるモデルとして表示しない

これらの点が改善されれば、より容易に構築された分子構造を把握できるようになると考えられる。また他の分子モデリングソフトと比べて、以下のような点で操作性が劣る。

- 分子構造のグラフィックス上で、原子/原子団を付け加えるような操作で分子を構築できない

これは Chem3D のようなソフト [7] では一般的なユーザ・インターフェースである。しかし本プログラムではこのようなインターフェースを採用しないことで、逆に Z-matrix による分子の構築ができるようにした。このためある意味では仕方のないことであるが、しかしプログラムの使いやすさという面では一歩後退した感も否めない。今後テンプレートを充実させることを考える必要があるかもしれない。

謝辞

本プログラムの開発にあたり、弘前大学総合情報処理センターの 1997 年度研究開発費による補助を受けた。ここに記して謝意を表す。このために本プログラムの使用権 (ソフトウェアをセンターのシステムにお

いて自由に使用する権利) をセンターが所有することを確認する。

またプログラムの動作確認や GUI を含むユーザインターフェースについて、貴重な意見を出してくれた以下の方々に感謝する。

早川 健、菅井孝安、駒嶺 哲、川上 淳、須藤 進、(敬称略)

さらに OSF/Motif を用いた X11 でのプログラミングについて、おもに NetNews を通じて見ず知らずにもかかわらず以下の皆様からの貴重な助言をいただいた。これには深く深く感謝する。本プログラムの完成により、わずかながらお返しができたのであれば幸いである。

乾 正知 (inui@hit.ipc.ibaraki.ac.jp)、 UMENO Takashi (umeno@ecchan.trad.pfu.co.jp)、
久松浩史 (hisama2@ocs.ogis-ri.co.jp)、 熊谷公良 (b96702@rsch.tuis.ac.jp)、
曽根賢一郎 (ksone@fa2.so-net.or.jp, VET04516@niftyserve.or.jp)、
中村 努 (tsutomu@rs.kyoto.omronsoft.co.jp)、 小野寺一浩 (696a0391@mn.waseda.ac.jp)、
本田大樹 (daiju@cresco.co.jp, CXY00401@niftyserve.or.jp)、 滑川裕樹 (hname@cs.titech.ac.jp)、
かべ (kabe@dais.is.tohoku.ac.jp)、 Iwao Watanabe (watanabe@luehdorfia.dsl.tutics.tut.ac.jp)、
妻鹿 崇 (mega@rodan.misc.hit-u.ac.jp)、 竹内一詔 (takeuchi.kazunori@sed-c.co.jp)、
田中伸哉 (t60725@hongo.ecc.u-tokyo.ac.jp)、 倉橋智彦 (kura@melchior.q.t.u-tokyo.ac.jp)、
下井優一 (shimoi-ort@h.u-tokyo.ac.jp)、 林 秀幸 (hideyuki@kobe.hp.com)、
藤枝和宏 (fujieda@jaist.ac.jp)、 Kousuke Tanzaki (xachy@tky0.attnet.or.jp)、
青山 尚夫 (aoyama@astec.co.jp)、 池田 (ikeda@bs1.dnes.nec.co.jp)、
田中 雅美 (masami@nalgo.co.jp)、 (敬称略)

さらにさらに、以下の方々には www ページで公開した “KUMI” β 版を試用していただき、貴重なご意見をお寄せいただいた。自分であまり使わない部分は、どうしても対応がおろそかに成りがちであることを痛感させられた。ここに深く感謝する。

大森 紀人 (ohmori@p.chiba-u.ac.jp)、 (敬称略)

付録 : Z-matrix Editor “KUMI” の使い方

A “KUMI” の特徴

Z-matrix Editor “KUMI” の特徴については、第 2 節を参照のこと。

B 環境

B.1 動作環境

プログラム “KUMI” 自体は Unix/X11 ベースのワークステーション上で動作する。GUI のために Motif ウィジットセット [15, 16] を用いている。

現在のところ

- owani8 (総合情報処理センター: UP4800, 汎用サーバ: Unix SVR4[20])
- picasso (総合情報処理センター: COMTEC4D, 画像処理システム: IRIX[21])
- PC-UNIX の動作している AT 互換機 (FreeBSD/XFree86[13, 14])

などのコンピュータで全く同等にコンパイルでき、動作することを確認している。[1]

[1] ホスト名などは弘前大学での事情

B.2 利用環境

“KUMI” を利用して分子を組み立てるためには次のようなシステムのいずれかが必要である。

- 上記のような X Window System が動作しているコンピュータ
- X 端末
- パーソナルコンピュータ (Windows[22] または Mac[23] など) とその上の X-server ソフト (eXodus[24] や MI/X[25] など)

カラー表示できるものが望ましいが、モノクロでも多階調表示できるのであれば本プログラムの利用が可能と思われる。2 階調表示しかできないディスプレイの場合には、分子のカラー表示が対応できない。

C 起動

owani8 で動作する “KUMI” を研究室の X11 が動いているコンピュータ (`mn.sci.hirosaki-u.ac.jp`) から利用することを例にとると、

1. telnet/rlogin 等で owani8 にログイン
2. DISPLAY 変数を設定

```
setenv DISPLAY mn.sci.hirosaki-u.ac.jp:0.0            (csh の場合)
DISPLAY=mn.sci.hirosaki-u.ac.jp:0.0 ; export DISPLAY  (bsh の場合)
```

3. KUMIDIR 変数に、‘KUMI.Template’ ファイルのあるディレクトリを設定

```
setenv KUMIDIR /home/rmiya/kumi                       (csh の場合)
KUMIDIR=/home/rmiya/kumi ; export KUMIDIR             (bsh の場合)
```

4. Z-matrix Editor “KUMI” の起動
   実行形式ファイルが `PATH` の通っているディレクトリにあるとすると、[2]

```
kumi.NEC
```

これで、画面に Z-matrix Editor のメインメニューが表示される (図 8)。

D 操作

操作の基本的な流れは、メインメニューからサブウインドウを開いて Z-matrix を入力したり分子を表示したりして作業を進める。表示された分子は向きを変えて任意の方向から見ることができる。また Z-matrix のデータを変更すると、その結果が表示されている構造に反映される。このため、入力した Z-matrix によって意図した構造の分子を組み立てることができているのかどうかを、視覚的に確認しながら作業を進めることができる。

[2] picasso の場合には `kumi.IRIX`

図 8: Main Menu Window.

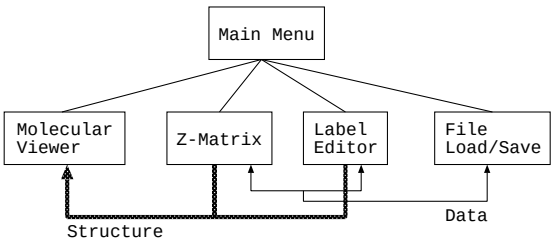

図 9: Structure of “KUMI”.

マウスでクリックしてメニューを選ぶ代わりに、キーボードからも操作できる。プルダウンメニューを開くのには [ALT]+⟨key⟩ で、その後は ⟨key⟩ を押せばよい。たとえば [Edit]-[Z-matrix] ならば `[ALT]+e z` と順にキーを押せば、Z-matrix の入力編集ウインドウが開く。または、`[ALT]+e` でプルダウンメニューを開いた後、矢印キーで Z-matrix の項目を選択してから [Enter] または [Space] を押すとウインドウが開く。

D.1 メインメニューでの操作

`[File]`

`[Load File]` データファイルを読み込む。ファイルは Gaussian の Z-matrix 形式とする。

`[Save Data]` データをファイルに保存する。Gaussian の Z-matrix 形式、MOPAC の Z-matrix 形式とデカルト座標形式のいずれかを選べる。

`[Quit KUMI]` プログラムを終了する。

`[SAve & Quit]` データをファイルに保存し、プログラムを終了する。

`[Edit]`

`[Z-matrix]` Gaussian の Z-matrix 形式でデータを入力作成する。分子構造のパラメータ (結合距離、結合角、二面角) としてラベルを用いることもできる。

`[Label]` Z-matrix 中で用いたラベルに、数値を定義する。

`[View]`

`[View Molecule]` 分子構造をグラフィック表示する。分子は向きや大きさをかえて見ることができる。

`[Help]`

`[About]` このプログラムについて。

`[Help]` 簡単な操作方法を説明する。

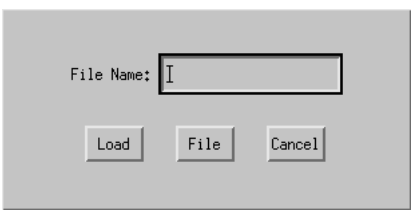

図 10: File Load Window.

D.2 Main menu: [File]-[Load]

データファイルを読み込む。

ファイル名を入力するか、[File] ボタンで表示されるリストからファイル名を選ぶ。[Load] ボタンで実際にファイルを読み込む。

受け付ける入力ファイルは Gaussian の Z-matrix の形式であるが、本来の Gaussian の形式に比べて少し制限がある。

入力ファイルの Z-matrix の形式

“KUMI” で受け付ける入力ファイルの Z-matrix の形式について、具体例を用いて以下に説明する。本プログラムでは構造パラメータにラベルを使用でき、これがこのプログラムの特徴の一つになっている。ただし定数ラベルは利用できない。もし定数ラベルが必要であれば、変数ラベルとして定義して分子を組み立てておいて、実際の計算時にデータファイルを修正する必要がある。また、構造パラメータをすべて Z-matrix 中に数値で記しラベル定義部分の無いデータファイルの場合であっても、データ終了の印である最後の空白行は合計 2 行必要である。

また Gaussian Z-matrix 形式のうちで、原子の接続関係を示すためには数字による原子指定だけが利用でき、ラベルの使用はできない。また原子の位置を一つの距離データと二つの接続角データで定義することもできない。

たとえば Gaussian94 は図 11 のようなファイルを入力データとして受け付ける。しかし “KUMI” では受け付けられない要素がいくつかある。

- 原子の接続関係を示すのに、例えば Cl1 は ‘‘C1’’ と接続するように記述しているが、ここは数字で ‘‘1’’ と書かないといけない。
- ラベルの定義欄に variable や constant がある。‘‘variable’’ とある行は空白でなければならないし、‘‘constant’’ の行は削除して詰める。
- 最終行に空白行を必要とする。

以上の点を修正して “KUMI” が受け付けるようにしたものは図 12 の通りになる。

```
--- from here
  # HF/3-21G  Opt=z-mat

  chloromethane

  0 1
    C1
    Cl1   C1  RCCl
    H11   C1  RCH  Cl1  AClCH
    H12   C1  RCH  Cl1  AClCH  H11  THCH
    H13   C1  RCH  Cl1  AClCH  H11  -THCH
    variable
    RCCl  1.89
    RCH   1.07
    AClCH  106.2
    constant
    THCH   120.0
--- end of data
```

図 11: 入力データ-1

```
--- from here
  # HF/3-21G  Opt

  chloromethane

  0 1
    C1
    Cl1   1  RCCl
    H11   1  RCH   2  AClCH
    H12   1  RCH   2  AClCH   3  THCH
    H13   1  RCH   2  AClCH   3  -THCH

    RCCl  1.89
    RCH   1.07
    AClCH  106.2
    THCH   120.0

--- end of data
```

図 12: 入力データ-2

D.3 Main menu: [File]-[Save]

データを保存する。

ファイル名を入力するか、[File] ボタンで表示されるリストからファイル名を選ぶ。[Save] ボタンでファイルを保存する。

保存の形式として Gaussian の Z-matrix の形式、MOPAC の Z-matrix の形式、またはデカルト座標系の xyz 形式のいずれかを選ぶことができる。Gaussian の Z-matrix の形式は “KUMI” で再び読み込める。デカルト座標系の xyz 形式は “KUMI” で再び読み込めないが、これは Rasmol[29] などの分子を 3D 表示するプログラムで受け付ける形式になっている。

既存のファイルへの上書きする場合には問い合わせのウインドウが開くので、[overwrite] ボタンをクリックする。

図 13: File Save Window.

D.4 Main menu: [View]-[View Molecule]

分子の構造を 3D グラフィックスで表示する。

右または下のスクロールバーで、分子の向きを回す。右上のスライダーで、分子を拡大・縮小する。

さらに、[SHIFT] キーを押しながら マウスの左ボタンで分子をドラッグすると、それに合わせて分子が x 軸または y 軸まわりに回転する。[ALT] キーを押しながらマウスの左ボタンで分子をドラッグすると、分子はスクリーンに垂直な軸 (z 軸) まわりに回転する。

目印のために座標軸や xy 平面を同時に表示させることができる。[View]-[XYZ-Axes] で、座標軸を表示/非表示する。[View]-[XY-Grid] で、xy 平面を表示/非表示する。

また [View]-[Numbering] で、Z-matrix での原子の順番の番号に対応した数字が原子の位置に表示される。

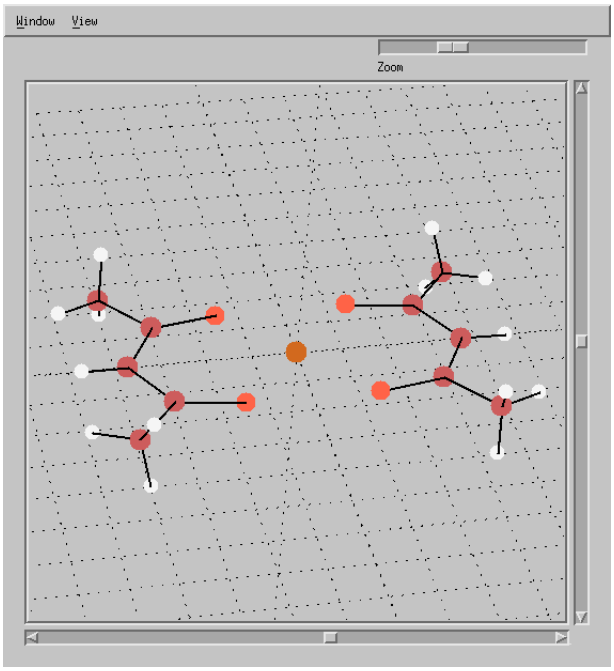

図 14: Moleculer View Window. Axes と grid を表示.

D.5 Z-matrix データの編集

ここでは Z-matrix を直接編集する。

`[Window]`

`[Close]` Z-matrix Edit ウインドウを閉じる。

[Edit]

[New Atom] 原子の入力欄を一つ追加する。

[Insert] 原子の入力欄をリストの途中に一つ追加する。

[Cut] 定義されている原子を削除する。

[Copy] 定義されている原子をバッファにコピーする。

[Paste] バッファに保存されている原子の定義を挿入する。

[Clear All] 全ての原子を削除する。

[Pack] 元素名の欄が空白の行を全て削除する。

[Send Label] フォーカスされているラベルについて、ラベルウインドウの対応する項目を表示する。未定義ラベルの場合には新規に項目を作成して数値の入力をうながす。

[Template] テンプレート機能で、原子を置換基に置き換える。置換基の構造には、ラベルを用いていない。現在用意されている置換基は、Methyl, Phenyl, Cyclohexyl, Amino, Carboxyl である。'KUMI.Template' というファイルに構造のデータが記述されている。環境変数 KUMIDIR に、'KUMI.Template' の存在するディレクトリを設定するか、このファイルをカレントディレクトリに置く。

[View]

[Apply] Z-matrix の変更を、分子の表示に反映させる。

[View Molecule] 分子構造をグラフィック表示する。分子は向きや大きさをかえて見ることができる。

入力した Z-matrix に基づいて分子を表示させるには、メニューから [View]-[View Molecule] して分子表示のウインドウを開く。また修正箇所を適宜分子表示に反映させるには、[View]-[Apply] する。
分子表示に際して Z-matrix に不整合なところがある場合には、注意のためのウインドウがでる。内容を確認の上で OK ボタンを押してウインドウを消し、該当箇所を修正すること。

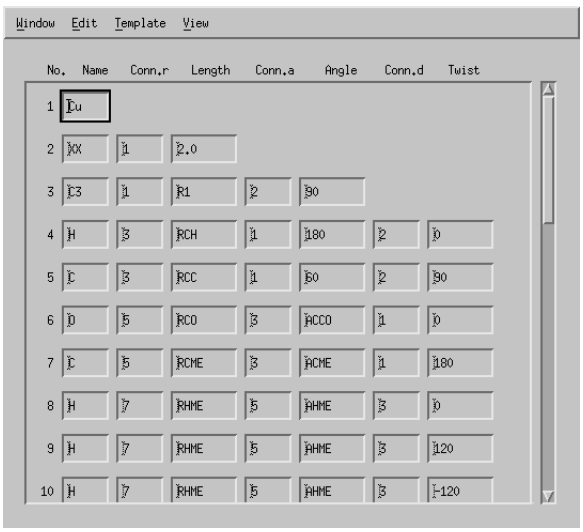

図 15: Z-matrix Edit Window.

D.6 Label 定義の編集

ここでは Label Edit ウインドウでの操作を説明する。

[Window]

[Close] Label Edit ウインドウを閉じる。

[Edit]

[New Label] Label 定義の入力欄を一つ追加する。

[Insert] フォーカスのある位置に空欄を挿入し、あらたな Label を入力できるようにする。

[Cut] 既存の Label を削除する。削除された Label は、内部のバッファに保存される。

[Copy] フォーカスされている Label をバッファにコピーする。

[Paste] バッファに保存されている Label 、フォーカスの位置に挿入する。

[Pack] 未記入な空欄を削除して詰める。

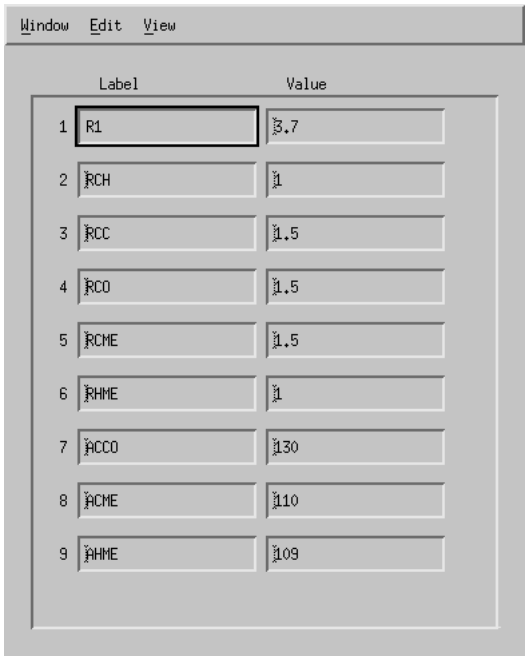

図 16: Label Edit Window.

[View]

[Apply] Label 定義の変更を、分子の表示に反映させる。

[View Molecule] 分子構造をグラフィック表示する。分子は向きや大きさをかえて見ることができる。

E 技術情報

E.1 インストール方法

ほとんどのマシンでそのままコンパイルできるはずだが、コンパイル時のオプションやライブラリのあるディレクトリなどは、環境に依存すると思われる。FreeBSD など確認のとれている幾つかの環境のためには config.sh スクリプトを用意した。

```
config.sh
make
```

とタイプすると、OS を判定してコンパイルオプションなどを設定してオブジェクトを作成するようになっている。その他の環境の場合には、適宜 config.sh スクリプトを変更されたい。なおその場合に config.sh スクリプトに順次追加したいので、作者まで連絡してほしい。

E.2 実行環境の制限

Z-matrix Ediror “KUMI” は Unix ワークステーション上で動作する。いわゆる Windows や MacOS では動作しない。これらのパソコンでは X-server プログラムを用いて、ワークステーションで動作している “KUMI” を利用できる。

“KUMI” は GUI に OSF/Motif 2.0 ライブラリを使用しているので、Unix ワークステーションにこのライブラリが必要である。もしくはライブラリまでスタティックにリンクした実行形式のファイルをほかのコンピュータで作成する必要がある。

Motif 2.0 が無い場合でも、Motif-1.2 互換を目指しているフリーのライブラリ lesstif-0.81 を用いると、“KUMI” のコンパイルは成功してプログラムは動作する。しかし期待したタイミングで分子の絵の再描画がおこらないようであるが、その場合でも [View]-[Re-Draw] すれば正常に分子が表示されるので、実用上の支障はないと思われる。

E.3 取り扱える分子の大きさの制限

この Z-matrix Ediror “KUMI” で取り扱える分子の大きさは、原子数 100 個まで、構造パラメータとしてのラベル 100 個までになっている。これ以上大きな分子を扱いたい場合には、header ファイル “kumi02.h” 中で `#define` されている `MAXATOM` と `MAXLABEL` を修正して再コンパイルすることが必要である。

E.4 取り扱える元素の種類

原子番号 109 の元素まで一応のデータは備えているので、周期表に記載されている全ての元素を取り扱える。原子間の結合は、vdW 半径などを参考にして描画している [28]。

E.5 ファイルへの入出力

“KUMI” で入力ファイルとして受け付けるのは、Gaussian の入力データ形式のファイルだけである。

出力するファイルの形式は Gaussian の入力データ形式、MOPAC の入力データ形式、直交座標系の xyz 形式を選択できる。このうち “KUMI” で再び読み込めるのは、Gaussian の形式だけで、その他の形式は読み込めない。

E.6 カラー・フォント

分子の表示に際しての元素ごとの色分け、ラベルやテキストなどの文字のフォントなどはハードコーディングされているので、設定ファイルなどで調整することはできない。

F 名前の由来

分子を組み立てるものだから、それを英語で言うと “Molecular Builder” であるが、しかしこんな一般的な名称はどこにでもありそうでつまらない。そこで日本人の人名のようなものとして “くみ” と命名した。

G 配布

いわゆる著作権は放棄しない。

本プログラムは、以下の URL で公開しているので参照されたい。

`http://www.st.hirosaki-u.ac.jp/~rmiya/kumi/kumi.html`

これまで配布されていたテスト版 (α、β 版) の再配布は禁止する。改変は認めるが、機能の改良や追加の参考にしたいので、その内容を報告してもらえればありがたい。

公開版については、学術目的の利用のための再配布や改変を積極的に認める。改変内容の報告を希望する。再配布には上記 URL に置いてあるパッケージしたソースプログラム全部とドキュメントをそのまま一括してあつかうこと。無許可での商業利用や他の商品への添付は禁止する。

本プログラムを研究に利用しその成果を公表する場合には、次のもの (本文書) を参考文献として記すこと。

宮本量, 弘前大学総合情報処理センター広報誌 HIROIN, No. 13, (1999), p 27.

"KUMI" を利用しての感想、要求、提案を作者宛に寄せてほしい。また動作不良箇所の報告も希望する。

なお、本プログラムのために生じた損害は保証しない。

参考文献

[1] Gaussian 94, Gaussian, Inc.

[2] MOPAC version 7, J. J. P. Stewart.

[3] Insight II/Discover, Molecular Simulations Inc.

[4] QUANTA/CHARMm, Molecular Simulations Inc.

[5] SPARTAN, Wavefunction, Inc.

[6] HyperChem, Hypercube, Inc.

[7] Chem3D, CambridgeSoft Co.

[8] H. Yoshida, H. Matsuura, *J. Chem. Software* **3**, 147 (1997); H. Yoshida, H. Matsuura, *J. Chem. Software* **4**, – (1997);

[9] 吉田弘, 広島大学理学部, http://vbl01.chem.sci.hiroshima-u.ac.jp/molda/molda.htm

[10] T. Clark, "計算化学ガイドブック", 丸善, p. 97, (1988).

[11] "Gaussian 94 User's Reference", Gaussian, Inc., p. 294 (1996).

[12] "MOPAC Manual (7th Ed.)", J. J. P. Stewart, (1993).

[13] FreeBSD 2.2.2 Release, FreeBSD, Inc.

[14] XFree86 3.3, X Consortium, Inc.

[15] Motif, Open Software Foundation.

[16] MOO-TIFF, a port of Motif for FreeBSD, InfoMagic, Inc.

[17] D. ヤング, "X Toolkit プログラミング OSF/MOTIF 版", 第 2 版, トッパン, (1995).

[18] 兜木昭男, 木下凌一, 栄谷政己, 林 秀幸, 安川悦子, "X-Window OSF/Motif プログラミング", 日刊工業新聞社, (1990).

[19] B. W. カーニハン, D. M. リッチー, “プログラミング言語 C 第 2 版”, 共立出版, (1989).

[20] UP-UX/V(Rel4.2MP), NEC Corporation, UNIX System Laboratories, Inc. (a wholly-owned subsidiary of Novell, Inc.), Microsoft Corp.

[21] IRIX Release 5.2 IP22, Silicon Graphics, Inc.

[22] Windows 3.1/95, Microsoft Corporation.

[23] MacOS 漢字 Talk7.5, Apple Computer, Inc.

[24] eXodus (for Windows and Macintosh), dit Co.,Ltd.

[25] MI/X (for Windows and Macintosh), MicroImages, Inc.

[26] オイラー角について: メシア, “量子力学”, 東京図書, vol. 2, p. 282, (1972).

[27] 佐藤義雄, “入門グラフィックス”, アスキー出版局, pp. 127–133, (1984).

[28] “化学便覧 基礎編”, 日本化学会編, 丸善, p. II-725, (1993).

[29] Rasmol, Roger Sayle, 1994; WWW page by Eric Martz,
http://klaatu.oit.umass.edu/microbio/rasmol