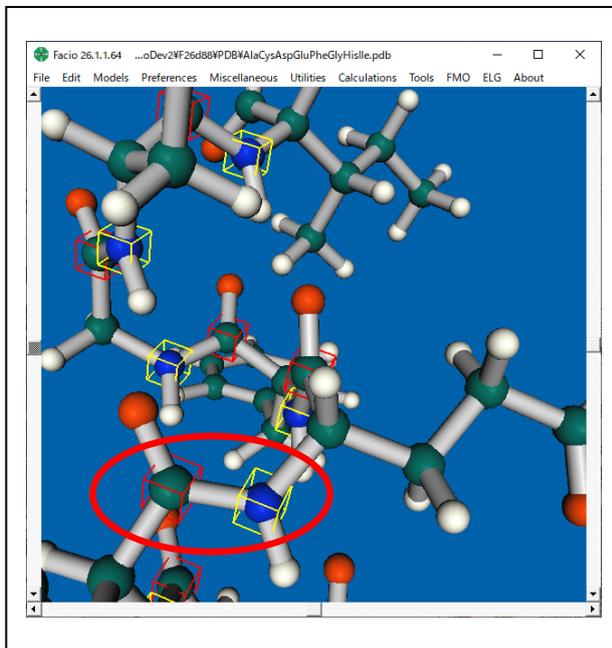
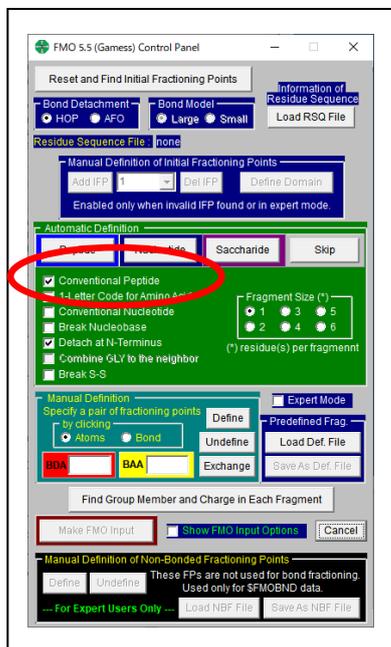


***** Facio 開発履歴 *****

【Ver. 26.2.1】 January 30, 2025 FMO/DFTBの入力ファイル中の\$DATAのバグを修正

【Ver. 26.1.1】 January 22, 2025

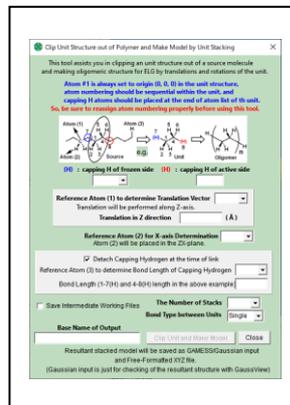
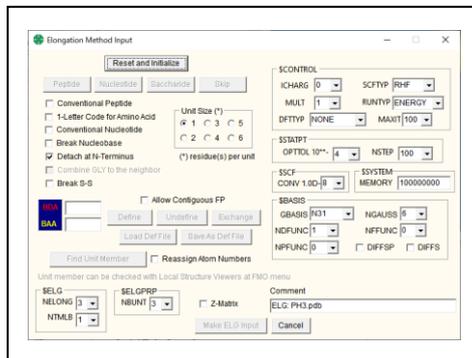
(1) これまで FMO 法におけるタンパク質の分割は α 炭素とカルボニル炭素の間であったが、GAMESS で新しく実装された「ペプチド結合間での分割、即ちカルボニル炭素とアミド窒素の間での分割 (conventional fragmentation)」に対応した。



(2) 座標軸の表示に関して

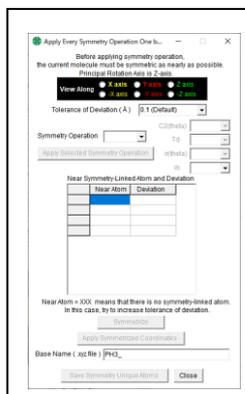
これまで X 軸(黄色) Y 軸 (水色) Z 軸 (ライムグリーン) としていたが、Y 軸の色を赤に変更し、更に各軸のマイナス側をすべて白にした。

(3) Elongation 法の入力ファイル作成およびユニットをスタックすることによるポリマーのモデリング機能



(4) 指定した対称性を課して構造を整える機能

(5) Z-Matrix Editor の実装

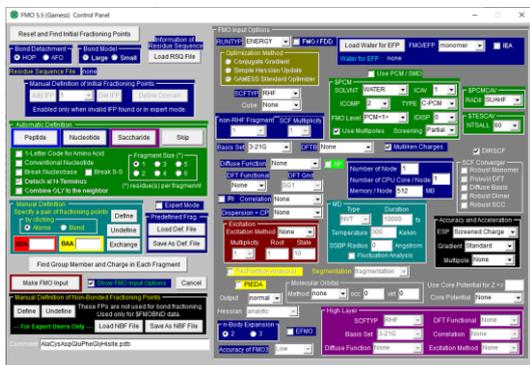


【Ver. 25.1.1】 April 25, 2023 バグ修正等

【Ver. 24.1.3】 October 1, 2022 Facioの子プロセスとしての Gamess および MOPAC の実行をチェックし改定しました。 Gamess の入力パネルで Invert IFREEZ を実装しました。

【Ver. 24.1.2】 September 13, 2022 FMO/ESP のデフォルト値を Standard に変更

【Ver. 24.1.1】 September 5, 2022



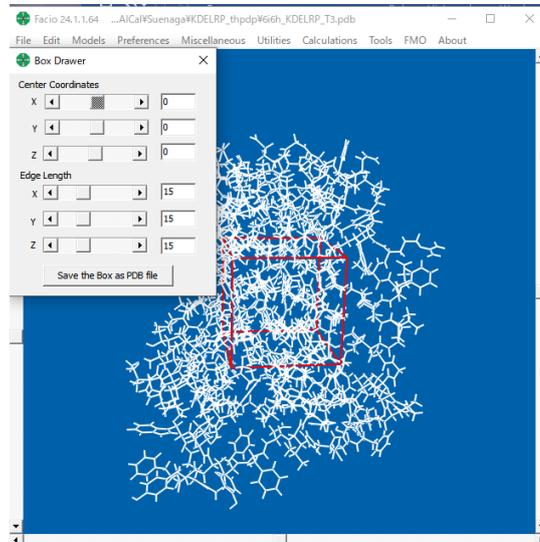
GUI for FMO 5.5

【Ver. 23.1.5】 July 14, 2021 バグ修正

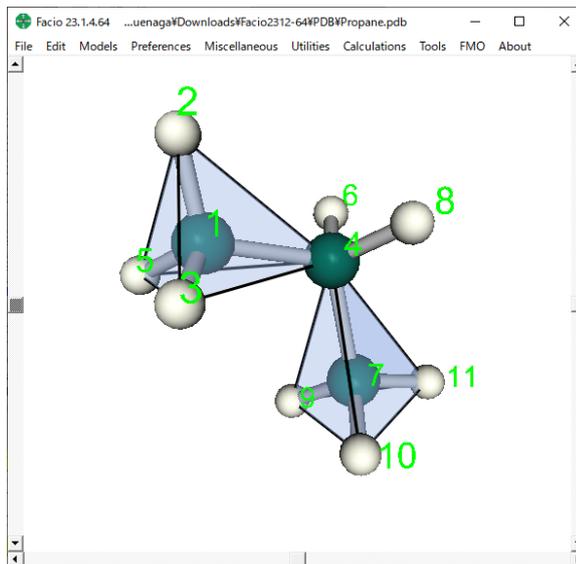
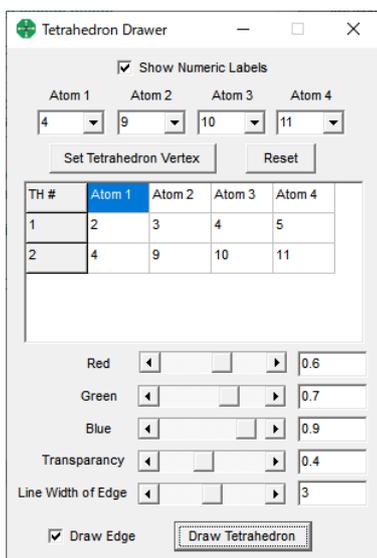
【Ver. 23.1.4】 July 1, 2021

Tetrahedron Drawer の実装。Tools メニューにあります。

指定した4つの原子を頂点とした半透明の四面体を描画します。



Box Drawer



【Ver. 23.1.3】 October 16, 2020 バグ修正

【Ver. 23.1.2】 October 12, 2020 FMO 5.4 対応 (32bit 版) およびバグ修正

【Ver. 23.1.1】 October 5, 2020 FMO 5.4 対応およびバグ修正

【Ver. 22.1.1】 December 25, 2018 FMO 5.3 対応およびバグ修正

【Ver. 21.2.1】 October 19, 2018 バグ修正

【Ver. 21.1.1】 April 24, 2018 64bit バージョンのリリースおよびバグ修正

【Ver. 20.1.3】 September 12, 2017 バグ修正

【Ver. 20.1.2】 August 17, 2017

【Ver. 20.1.1】 August 12, 2017 FMO の GUI の改訂等

【Ver. 19.2.1】 July 23, 2016

FMO メニューの “Find Neighboring Fragments” の改訂

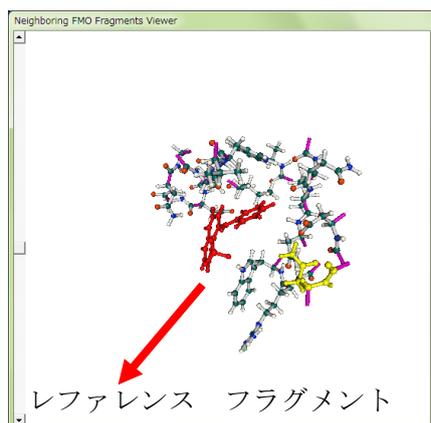
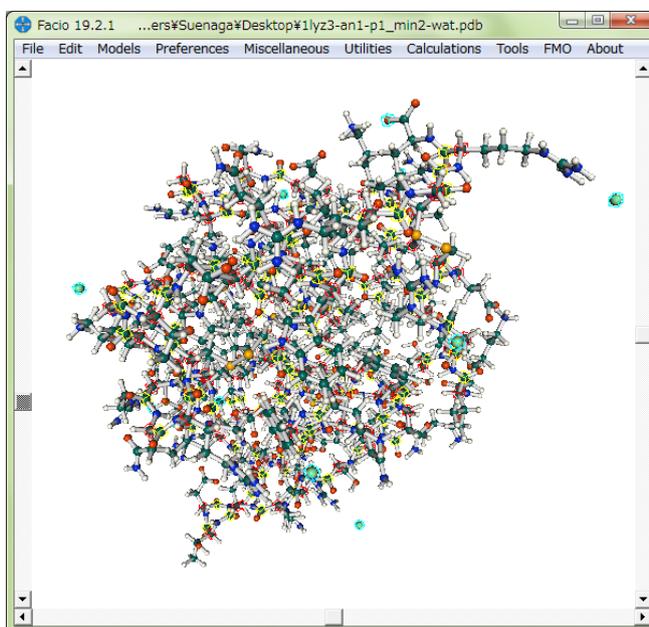
Reference FMO Fragment # 125
Reference Fragment is drawn in red.
 Long Range (up to 200 Angstroms)
Min Distance 3
 Find Fragment(s) in between (Angstroms)
Max Distance 8
Find Close Viewer (Angstroms)

	Ref. Atom	Near Atom	Frag. #	Dist.
1	1962	886	58	5.4605
2	1962	887	58	6.5567
3	1962	888	58	4.5535
4	1962	889	58	3.6791
5	1962	890	58	5.0410
6	1962	891	58	5.6396
7	1962	892	58	4.0977
8	1962	893	58	3.6931
9	1962	894	58	3.4632

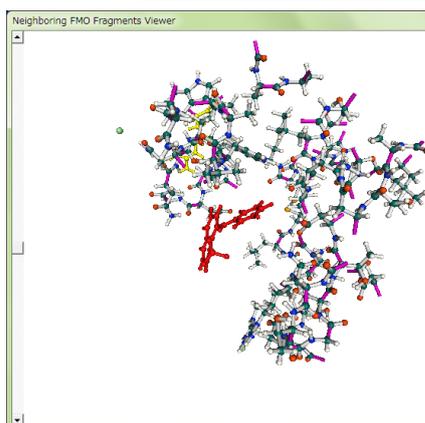
Show Numeric Labels
Neighboring Fragment # 51 (drawn in yellow)
Save Neighboring Fragments As PDB
 Renummer to make serial number serial

レファレンスフラグメント

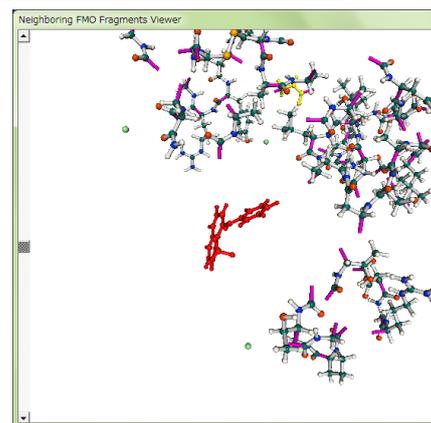
近傍を定義する範囲



5-10 Å近傍



10-15 Å近傍



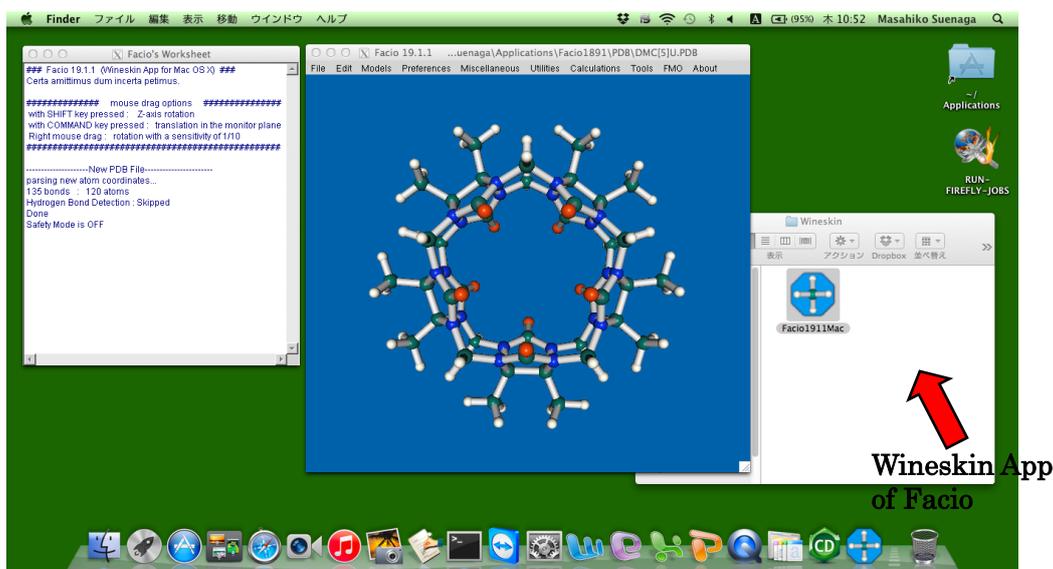
15-20 Å近傍

- 【Ver. 19.1.7】 May 25, 2016 MOPAC2016 の出力の読み込みに関する修正
- 【Ver. 19.1.6】 February 17, 2016 Summarize Energy/Grad/Geometry Changes に関する修正
- 【Ver. 19.1.5】 February 3, 2016 Summarize Energy/Grad/Geometry Changes に関する修正
- 【Ver. 19.1.4】 July 18, 2015 NMR Shielding Tensor の読み込みに関する修正
- 【Ver. 19.1.3】 April 23, 2015 MOPAC 6.06 の二つの異なる出力フォーマットに対応
- 【Ver. 19.1.2】 April 9, 2015 MOPAC2012 ver. 15 に関するバグ修正
- 【Ver. 19.1.1】 April 4, 2015

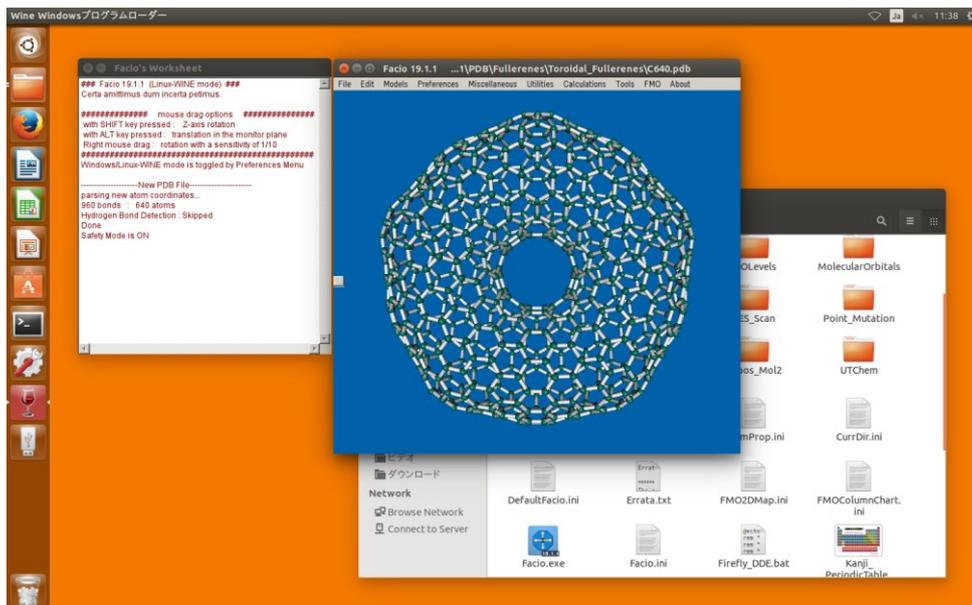
Mac OS X および Ubuntu Linux 上での動作（特に外部プログラムを Facio の子プロセスとして起動させる場合）を全面的に見直して改善しました。

Tinker, MSMS, MOPAC2012 を Mac OS X, Ubuntu Linux 上で Facio と連携させて使う場合は、Windows 版を使って下さい。

Mac OS X 用に、下に示すような Wineskin App 版を用意しました。



Ubuntu Linux 上で使用する場合は、予め wine をインストールしておき、Facio を Linux-WINE モードにして下さい。Firefly は、Windows 版と Linux 版の両方が使えますが、Gamess (US) は、Linux 版のみです。



【Ver. 18.8.2】 October 24, 2014 MOPAC2012 Ver. 14 による 1 原子および 2 原子分子の計算結果の読み込みに関するバグの修正。

【Ver. 18.8.1】 August 14, 2014 水素原子との結合を探すルーチンのバグを修正。

このバグは, Facio 16. 1. 1 以降, FMO のフラグメント分割に影響した可能性有り。

【Ver. 18.7.4】 July 26, 2014 Gamess の Current Directory の記録に関するバグの修正

【Ver. 18.7.3】 July 1, 2014

FMO 入力ファイルの \$DATA に関するバグ (Facio 18.6.1~18.7.2 に含まれる) を修正

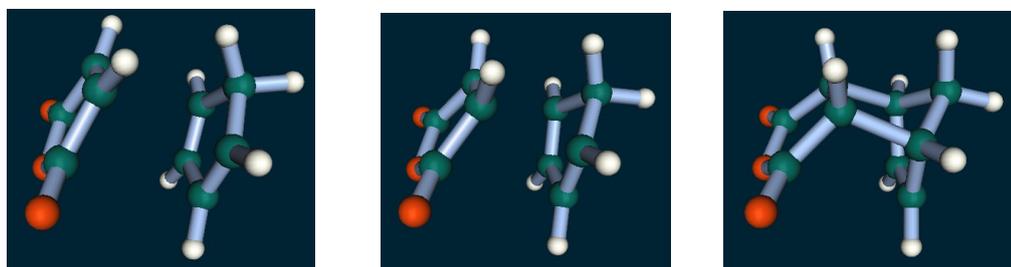
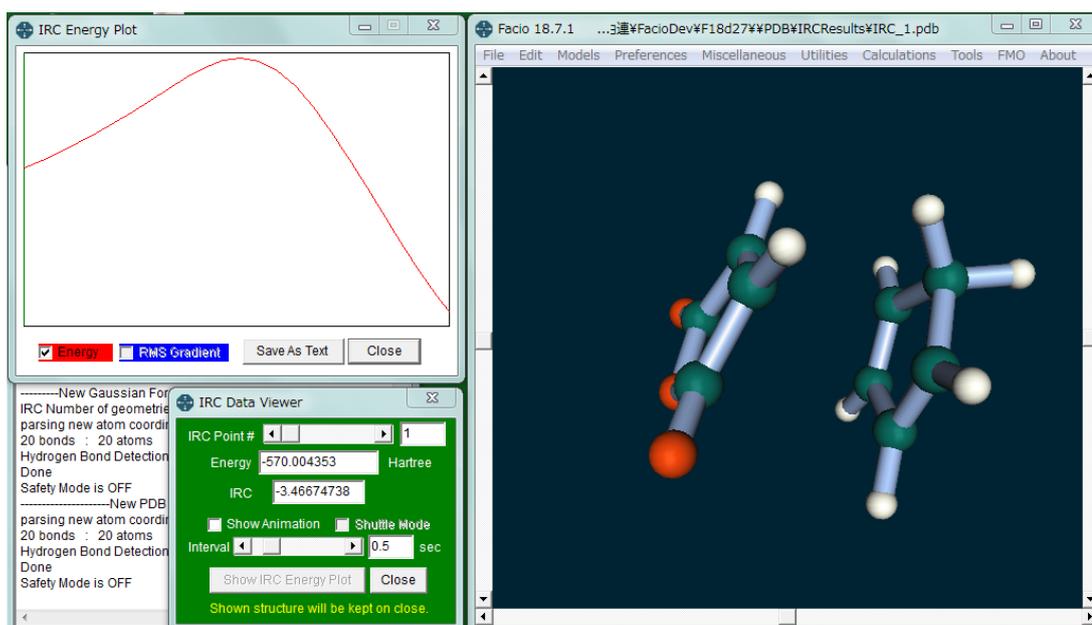
【Ver. 18.7.2】 June 28, 2014 Gaussian の Current Directory の記録に関する小さな修正

【Ver. 18.7.1】 June 16, 2014

(1) IRC の各点をそれぞれ別の PDB ファイルとして保存するように変更した。

保存場所は, Facio のルートフォルダの PDB\IRResults

これにより, IRC の各点の構造の結合が適切に表示されるようになった。



遷移状態

(2) MOPAC2012 の Ver. 14 と Ver. 13 では, Cartesian Coordinate の出力フォーマットが異なっている。これに対応するようにした。

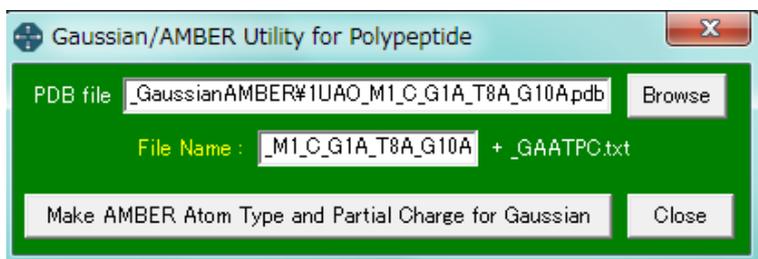
(3) Gaussian Link 0 の %NProc を %NProcShared に変更した。

(4) PDB, Gamess, Gaussian, Gaussian formatted check file に対する Current Directory を CurrDir. ini に保存するようにした。これにより, これらのファイルの読み込みや保存の際のフォルダーの変更が容易になりより使い易くなった。

【Ver. 18.6.2】 April 12, 2014 Tinker / newton.exe の起動に関するバグの修正

【Ver. 18.6.1】 April 5, 2014

タンパク質の PDB ファイルを読み込み、Gaussian による AMBER 力場計算に必要な Atom Type と Partial Charge をテキストファイルとして出力する機能



Tools メニューの Gaussian/AMBER Utility

-N3-0.1414
-CT-0.0962
-C-0.6163
-O--0.5722
-CT--0.0597
-H-0.1997
-H-0.1997
-H-0.1997
-HP-0.0889
-HC-0.0300
...
...

Atom Type と Partial Charge

```
# Amber Opt
*** GaussianAMBER ***
-2 1
N1 -6.778000 -1.424000 4.200000
C2 -6.878000 -0.708000 2.896000
C3 -5.557000 -0.840000 2.138000
O4 -4.640000 -1.504000 2.579000
C5 -7.165000 0.737000 3.141000
H6 -5.778000 -1.527000 4.462000
H7 -7.214000 -2.365000 4.112000
H8 -7.273000 -0.879000 4.933000
H9 -7.677000 -1.140000 2.309000
H10 -7.347000 1.267000 2.189000
...
...
```

通し番号を
削除

```
# Amber Opt
*** GaussianAMBER ***
-2 1
N -6.778000 -1.424000 4.200000
C -6.878000 -0.708000 2.896000
C -5.557000 -0.840000 2.138000
O -4.640000 -1.504000 2.579000
C -7.165000 0.737000 3.141000
H -5.778000 -1.527000 4.462000
H -7.214000 -2.365000 4.112000
H -7.273000 -0.879000 4.933000
H -7.677000 -1.140000 2.309000
H -7.347000 1.267000 2.189000
...
...
```

Atom Type と Partial Charge を
貼り付ける

```
# Amber Opt
*** GaussianAMBER ***
-2 1
N N3-0.1414 -6.778000 -1.424000 4.200000
C CT-0.0962 -6.878000 -0.708000 2.896000
C C-0.6163 -5.557000 -0.840000 2.138000
O O--0.5722 -4.640000 -1.504000 2.579000
C CT--0.0597 -7.165000 0.737000 3.141000
H H-0.1997 -5.778000 -1.527000 4.462000
H H-0.1997 -7.214000 -2.365000 4.112000
H H-0.1997 -7.273000 -0.879000 4.933000
H HP-0.0889 -7.677000 -1.140000 2.309000
H HC-0.0300 -7.347000 1.267000 2.189000
...
...
```

Gaussian/AMBER 計算

【Ver. 18.5.2】 February 1, 2014 マイナーバグ修正版

【Ver. 18.5.1】 December 14, 2013

閾値以下の相互作用をするフラグメントを白色半透明に表示する機能。

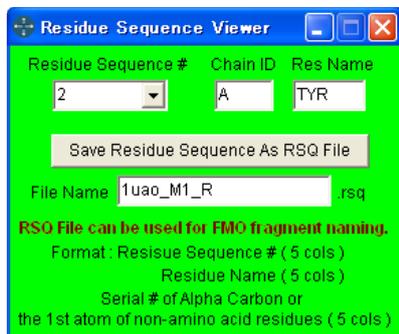
The figure displays three rows of screenshots illustrating the 'Total Pair Interaction' heatmap and the corresponding 3D molecular model in Facio 18.5.1. The top row shows the initial state with $P=0$ and $M=0$. The middle row shows the state after setting $P=1$ and $M=0$. The bottom row shows the state after setting $P=1$ and $M=-1$. A red box highlights the 'Set Threshold' controls in the heatmap interface, which are used to adjust the interaction strength between fragments.

Row	Heatmap Interaction	3D Model Interaction
1	Most interactions are visible (colored).	$P=0$ $M=0$
2	Weak interactions are faded (white semi-transparent).	$P=1$ $M=0$
3	Weak interactions are faded (white semi-transparent).	$P=1$ $M=-1$

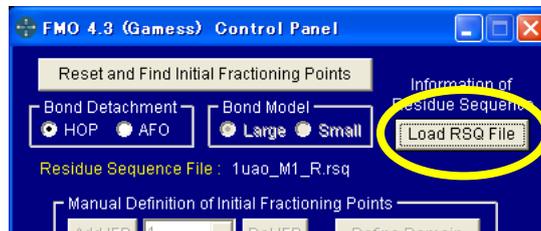
【Ver. 18.4.1】 October 19, 2013

(1) PDB ファイルの残基名と残基番号を FMO のフラグメント名に利用できる機能

FMO メニュー-PDB Utilities
Residue Sequence Viewer



32	GLY	2
33	ALA	15
34	GLU	25
35	LEU	40
36	LEU	59
37	SER	78
38	GLN	89
39	GLN	106
40	TRP	123



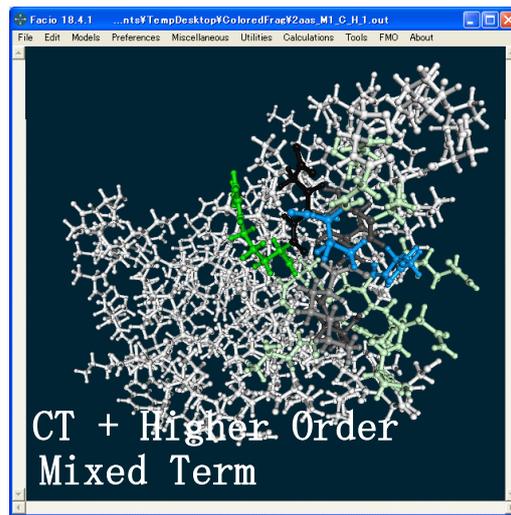
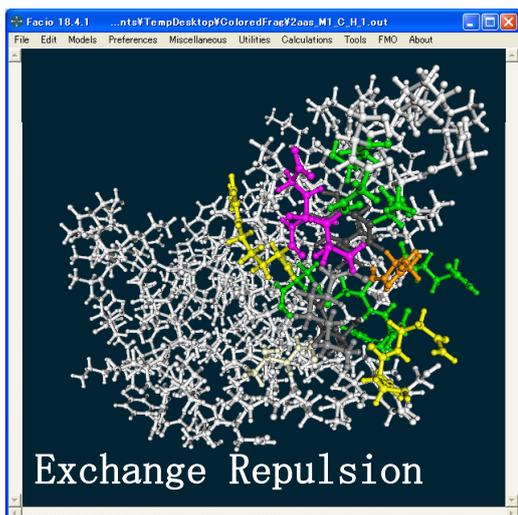
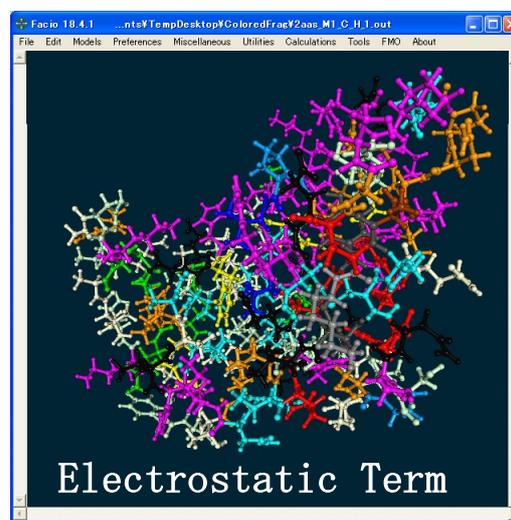
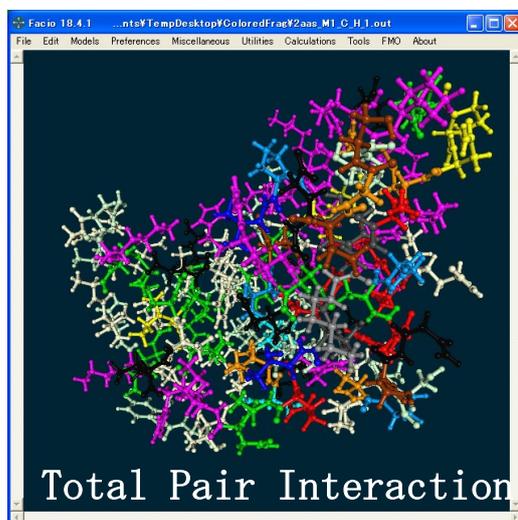
FMO フラグメントの作成時に
RSQ ファイルを読み込む。

残基番号, 残基名, α 炭素位置を
RSQ ファイルとして保存する。

RSQ ファイル

(2) FMO フラグメント相互作用の大きさに応じてフラグメントを色分けする機能.

2D Map of FMO Fragment Interaction パネルに機能を ON にするためのチェックボックスがある.



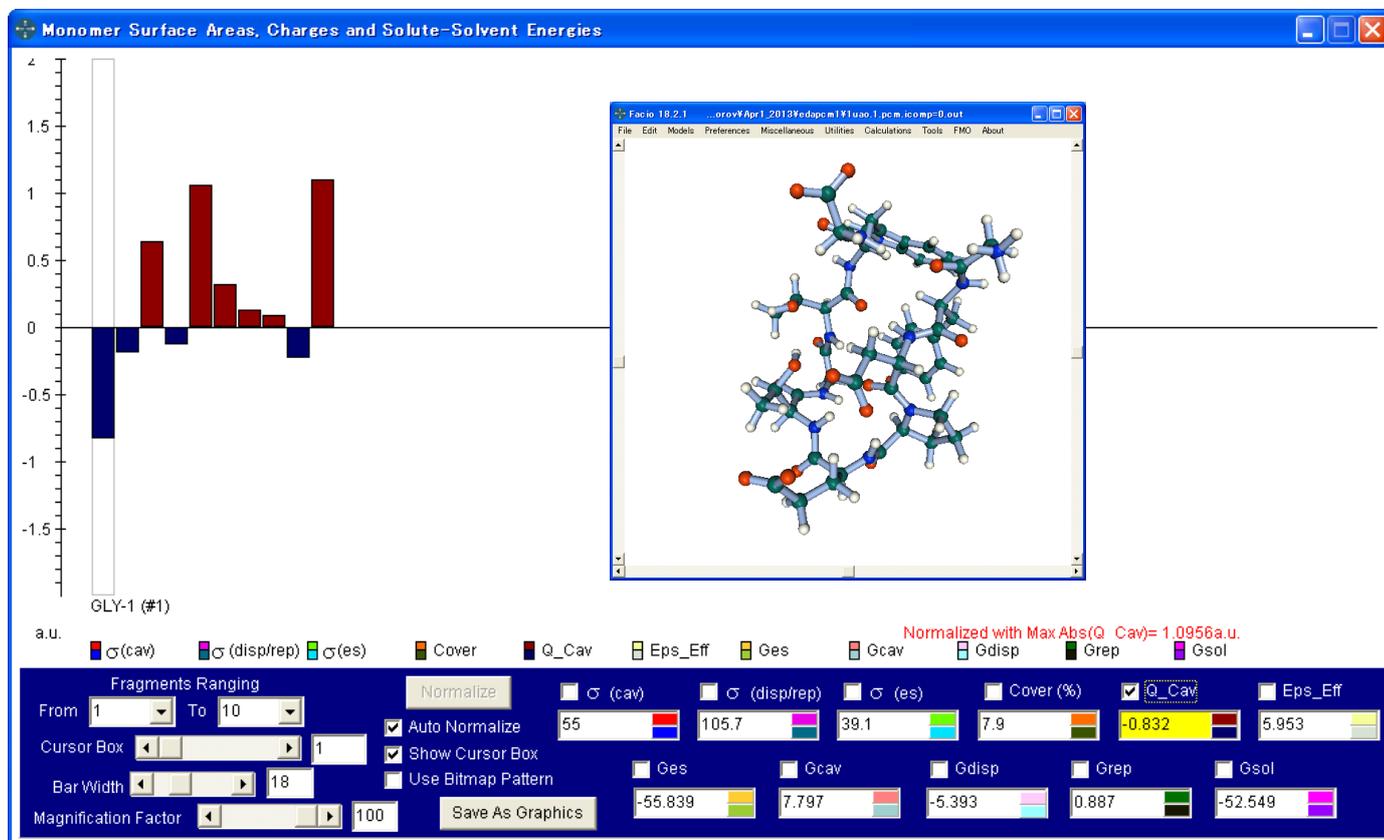
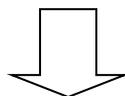
【Ver. 18.3.1】 August 31, 2013 バグ修正

【Ver. 18.2.1】 August 17, 2013

(1) FMO/PCM で計算した溶液中におけるフラグメントの特性とフラグメント間相互作用の可視化

Monomer surface areas (in Å²), charges (a.u.) and solute-solvent energies (kcal/mol).

I	surf_cav	disp/rep	surf_es	cover,%	q_cav	eps_eff	Ges	Gcav	Gdisp	Grep	Gsol
1 (GLY-1)	55.0	105.7	39.1	7.9	-0.8320	5.953	-55.839	7.797	-5.393	0.887	-52.549
2 (TYR-2)	139.9	107.5	56.6	11.4	-0.1865	0.000	-7.014	18.871	-7.198	1.038	5.697
3 (ASP-3)	78.5	56.3	36.3	7.3	0.6364	2.750	-44.025	10.512	-3.198	0.516	-36.195
4 (PRO-4)	82.5	84.7	34.1	6.9	-0.1293	0.000	-0.670	11.404	-5.161	0.761	6.336
5 (GLU-5)	107.6	159.1	74.4	15.0	1.0617	-16.207	-71.093	14.511	-9.263	1.424	-64.421
6 (THR-6)	76.1	72.0	38.5	7.8	0.3186	0.000	-7.465	10.432	-4.005	0.590	-0.448
7 (GLY-7)	44.3	41.2	22.4	4.5	0.1317	0.000	-4.375	5.997	-2.166	0.369	-0.174
8 (THR-8)	87.0	95.8	41.6	8.4	0.0877	0.000	-6.946	11.989	-5.640	0.837	0.240
9 (TRP-9)	161.9	206.9	85.6	17.3	-0.2301	0.000	-6.334	21.831	-13.948	1.924	3.473
10 (GLY-10)	95.2	124.5	66.9	13.5	1.0956	-10.459	-85.693	12.682	-7.004	1.154	-78.860



Ref. *J. Phys. Chem. A* 2012, 116, 704-719. D. G. Fedorov and K. Kitaura
"Energy Decomposition Analysis in Solution Based on the Fragment Molecular Orbital Method"

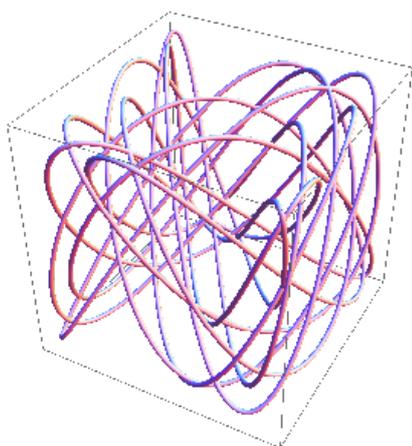
【Ver. 18.1.1】 July 3, 2013

(1) クォータニオンを使った回転

マウスの動きによる分子の回転のやり方を見直し、クォータニオンによる回転を実装しました。これにより、これまで回転に伴ういろいろな問題が解決されました。

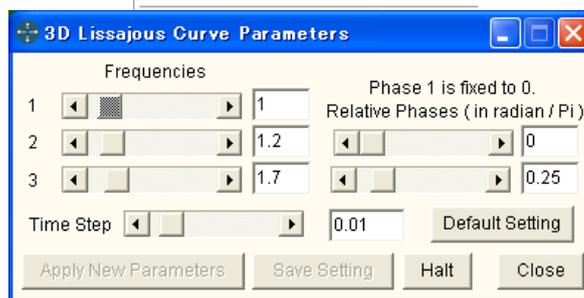
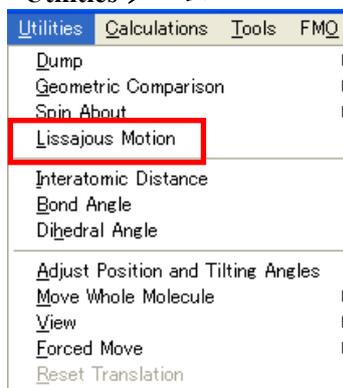
(2) リサージュ図形に沿った動き

クォータニオンによる回転を実装したことにより、リサージュの図形に沿った動きのような非常に複雑な回転が可能となりました。



Mathematica により
求めた 3D リサージュ図形

Utilities メニュー

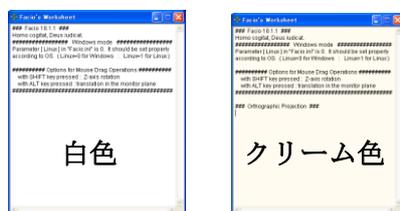


3D リサージュ曲線のパラメータ設定パネル

(3) 正射影 (Orthographic Projection)

正射影による表示もまた見直し、マウスクリックによる操作 (原子の選択など) が行えるようになりました。

投影方法の違いにより、Facio の Worksheet の背景色が変化します。



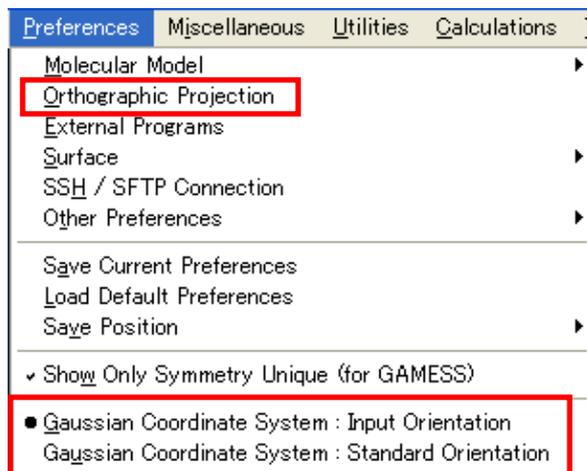
Perspective

Orthographic

(4) Input Orientation と Standard Orientation

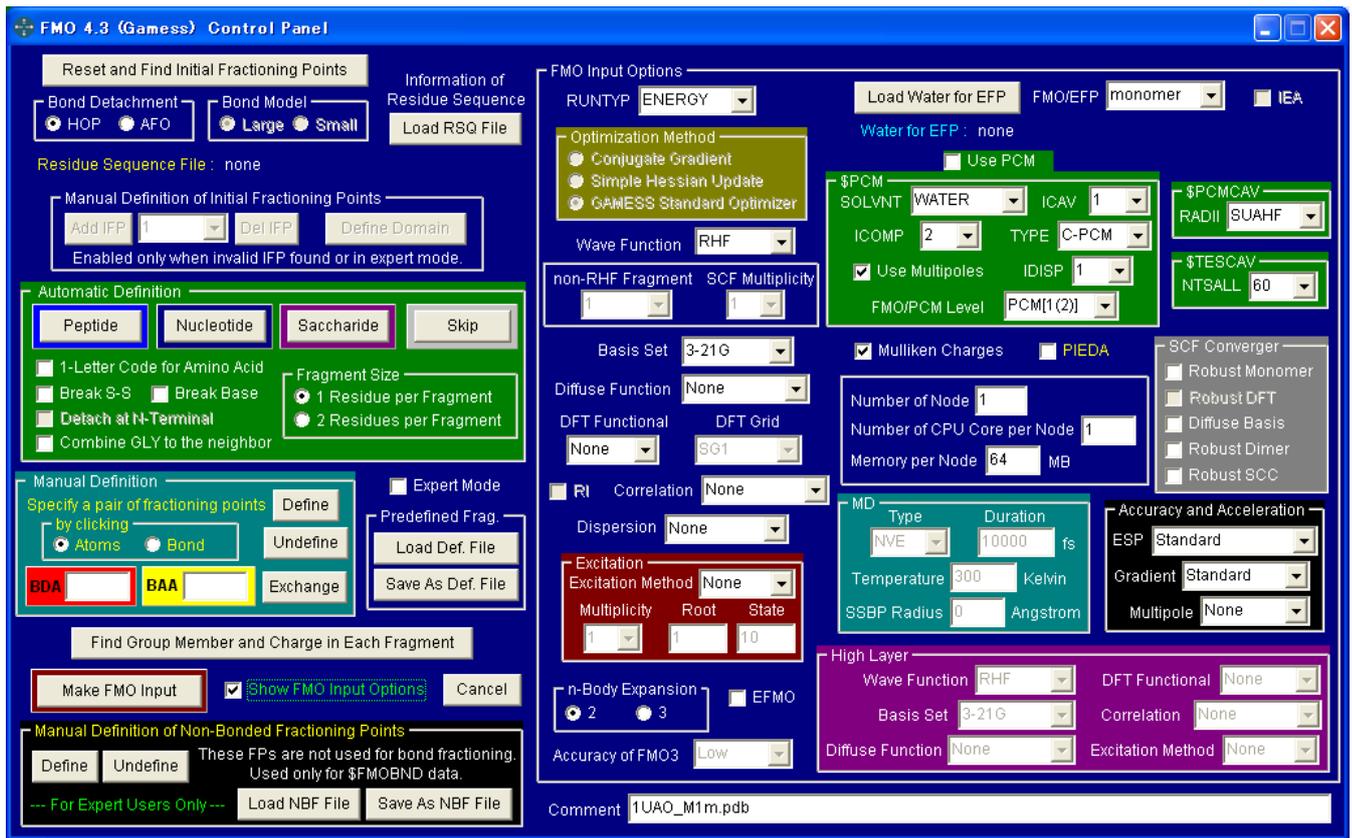
Gaussian の出力には、Input Orientation と Standard Orientation の 2 つの座標系がありますが、構造最適化の過程における構造変化を見る場合には座標系の再配向が無い Input Orientation が適しており、双極子モーメントをベクトルで表示する場合には、Standard Orientation が必要です。このように、目的に合わせて座標系が選べるように改良しました。

Preferences メニュー

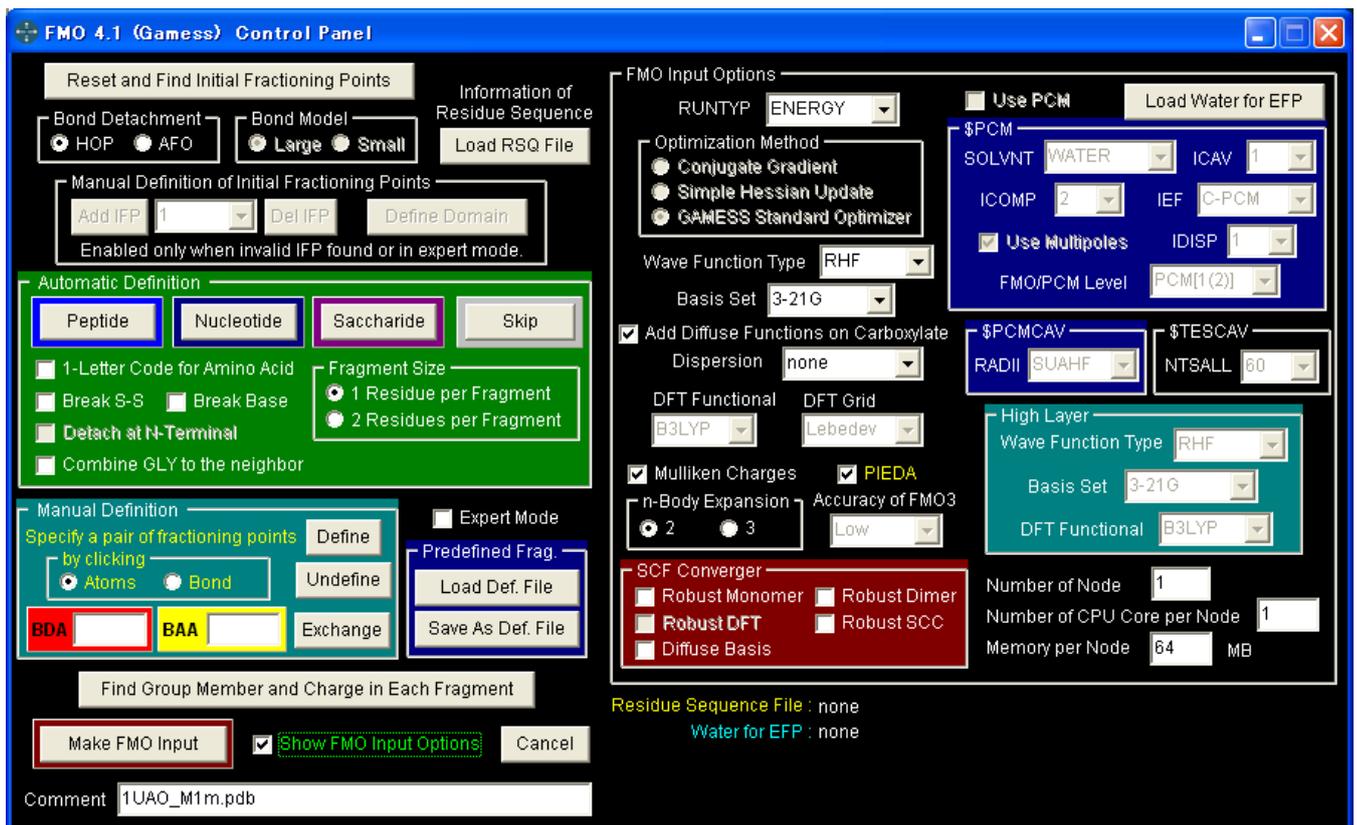


【Ver. 17.1.2】 May 29, 2013 バグ修正

【Ver. 17.1.1】 May 3, 2013 FMO 4.3 (GAMESS)対応の新しい GUI



FMO 4.1 (GAMESS)対応の GUI も引き続き使うことができます。切り替えは、FMO メニューから。



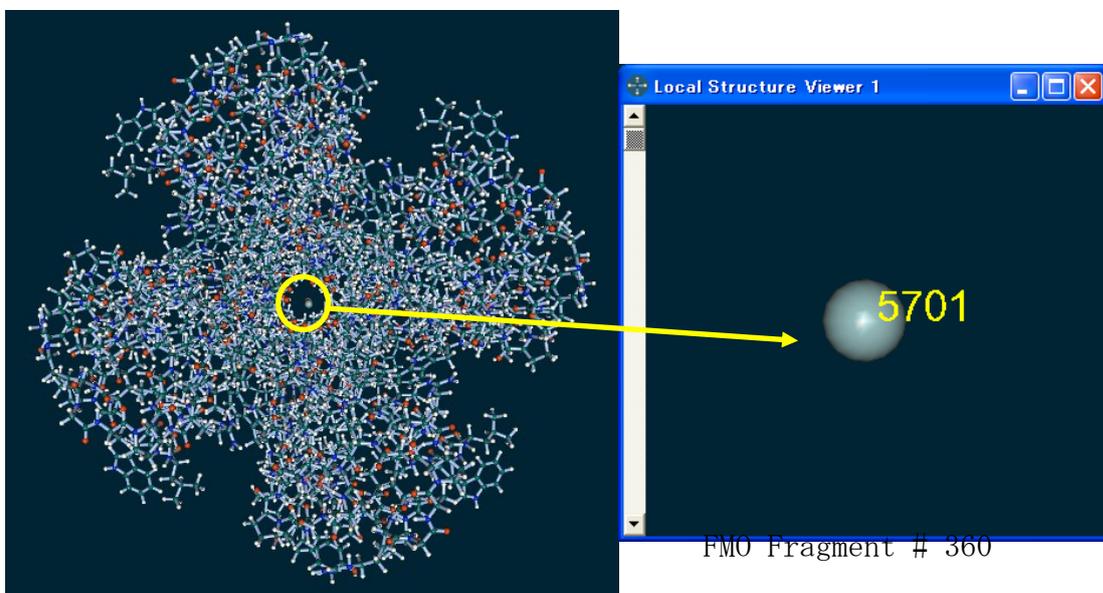
【Ver. 16.4.2】 March 30, 2013 バグ修正や機能の改良

【Ver. 16.3.1】 August 4, 2012, 【Ver. 16.4.1】 August 8, 2012 バグ修正や機能の改良

【Ver. 16.2.1】 May 26, 2012 バグ修正や機能の改良

【Ver. 16.1.1】 March 30, 2012

(1) 近傍にある FMO フラグメントを抜き出して PDB ファイルとして保存する機能
(例)



1BL8.pdb (カリウムチャンネル)

(K⁺ ion)

Find Neighboring Fragments

Reference FMO Fragment # 360

Min Distance 4 (Angstroms)

Find

Close Viewer Show Numeric Labels
Reference Fragment is drawn in red

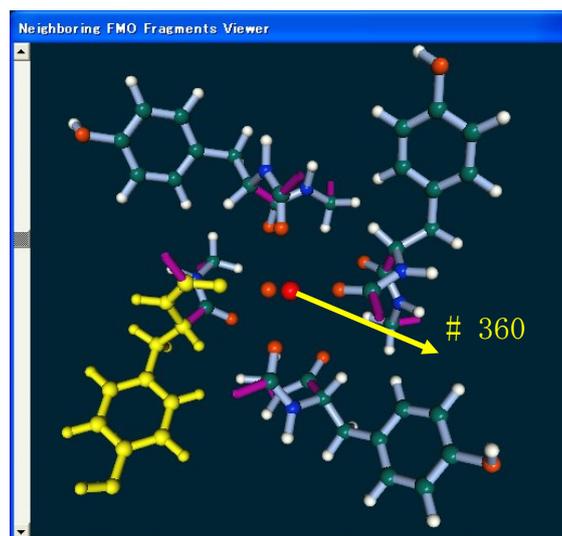
	Ref. Atom	Near Atom	Frag. #	Dist.
1	5701	790	50	3.1346
2	5701	796	51	3.6585
3	5701	797	51	3.0811
4	5701	820	51	3.4881
5	5701	2215	140	3.1195
6	5701	2221	141	3.6411
7	5701	2222	141	3.0659
8	5701	2245	141	3.4662
9	5701	3640	230	3.1492

Neighboring Fragment(s) # 50 (Drawn in yellow)

Save Neighboring Fragments As PDB

Renummer to make serial number serial

#360 の近傍 (4Å) にある
フラグメントを見つける。



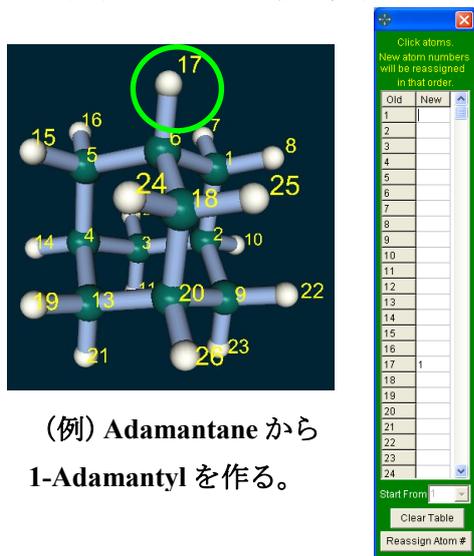
#360 の近傍にあるフラグメント
50, 51, 140, 141, 230, 231,
320, 320, 321 および 363

PDB として保存

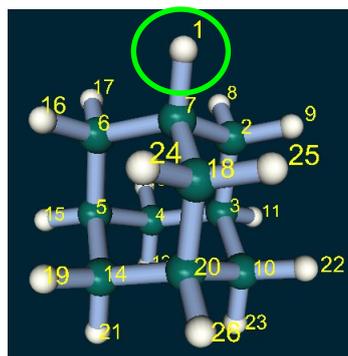
【Ver. 15.1.2】 January 22, 2012 GAMESS VERSION = 11 AUG 2011 (R1) に対応。

【Ver. 15.1.1】 July 18, 2011

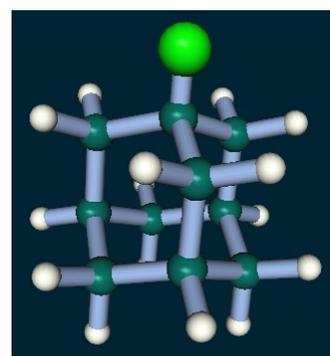
(1) ユーザー定義の置換基



(例) Adamantane から 1-Adamantyl を作る。



Utilities メニューの Reassign Atom Numbers で 17 番の水素を 1 番にする。

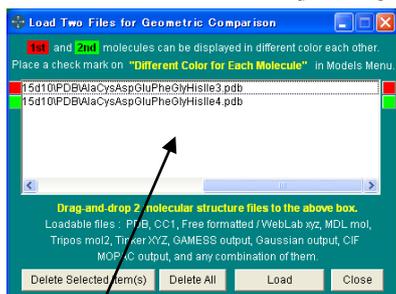


File メニューの Save As User Defined Substituent で保存する。

Edit メニューの Replace H with User Defined Substituent を選択し、置換しようとする水素をクリックすると定義した置換基のリストが現れるので、置換基を選ぶ。

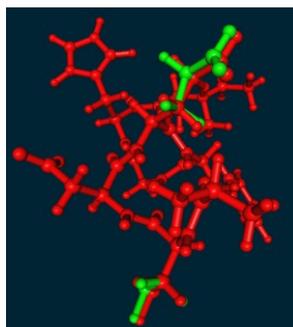
(2) RMS を最小にするような重ね合わせ機能を Quaternion で実装

Utilities メニューの Geometry Comparison >>
Load Two Molecules for Geometry Comparison



2つの構造をここへドラッグ&ドロップする。

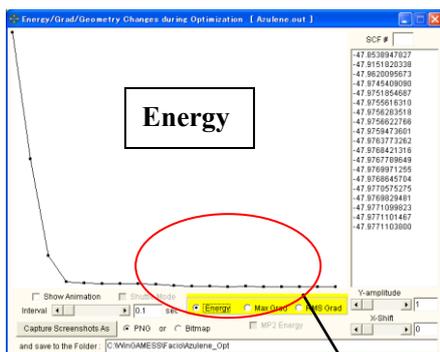
Utilities メニューの Geometry Comparison >>
RMS Fit by Quaternion



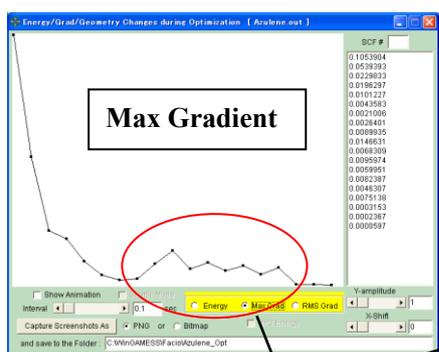
Models メニューの Different Colors for Two Molecules により、2つの分子の差異がはっきりする。

(3) FMO 4.0 の新機能 (PCM で Gradient および Optimize の計算、経験的分散力) への対応

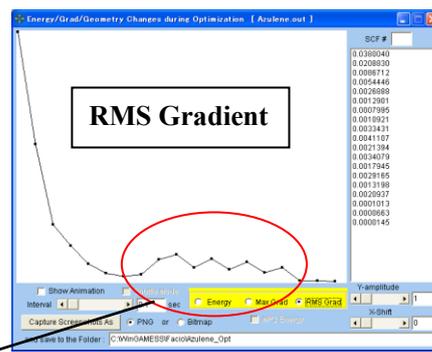
(4) 構造最適化の各ステップにおける Max Gradient と RMS Gradient の変化を表示



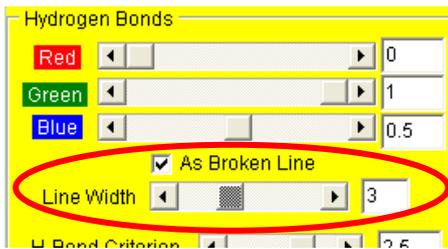
エネルギーは、収束しているように見えるが



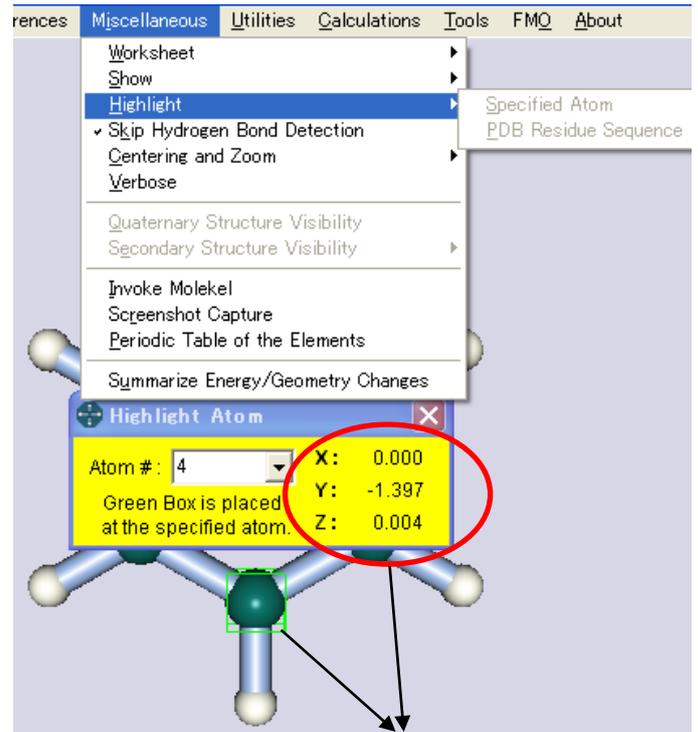
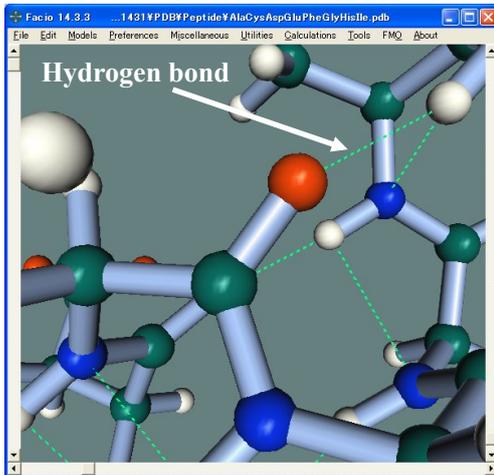
Gradient は、まだ収束していない



【Ver. 14.3.3】 March 28, 2011 バグ修正と水素結合および座標の表示



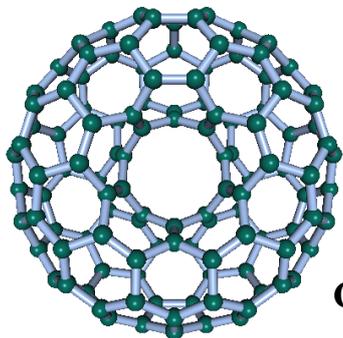
Bond Properties in Preferences menu



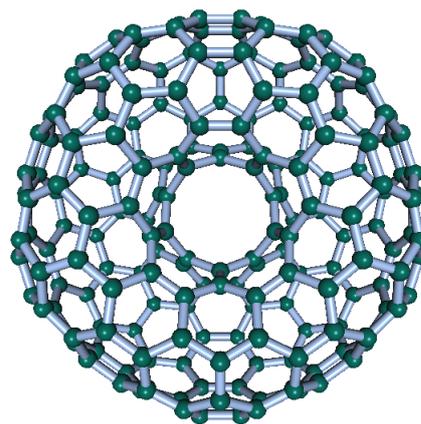
Highlighted atom and its coordinate

【Ver. 14.3.2】 November 6, 2010 バグ修正とトーラス型フラーレンのモデル

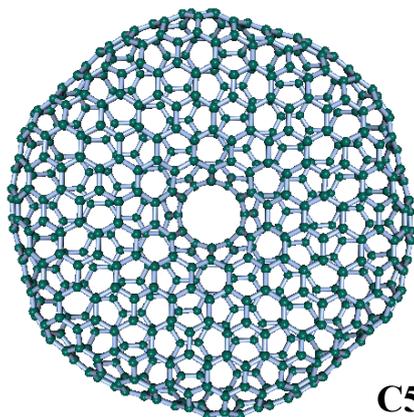
Toroidal Fullerenes



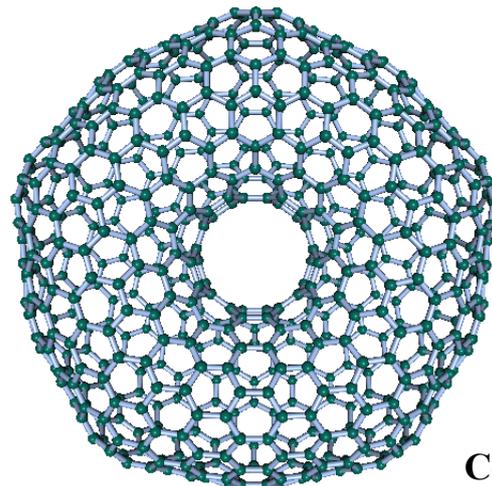
C120



C200



C588



C640

【Ver. 14.3.1】 July 1, 2010

- (1) PDB Utilities の新機能。 近傍にある水分子を探し出してファイルに保存する。
 水を含むタンパク質のデータなら、タンパク質のみのファイルと水だけのファイルを始めに作成し、2つを読み込んで近傍の水を探す。

MD 計算の際に、タンパク質の周りに置かれた水の溶媒和 BOX

タンパク質のみ

タンパク質の 3 Å 近傍に存在する水分子を見つけ抜き出す。

タンパク質と近傍の水分子

水分子のみ

見つかった近傍の水分子は、**Gamess/FMO の EFP (Effective Fragment Potential) 法**という溶媒効果を取り入れた計算で使用する。入力ファイルの作成は自動化されており、**FMO のコントロールパネルで Load Water for EFP ボタン**をクリックし、水分子の PDB ファイルを指定するだけでよい。

- (2) Local Structure Viewer に表示された構造もしくは指定した原子の近傍にある原子を抜き出して別の PDB ファイルに保存する機能

4つのフラグメントグループを一つの PDB ファイルに保存する。

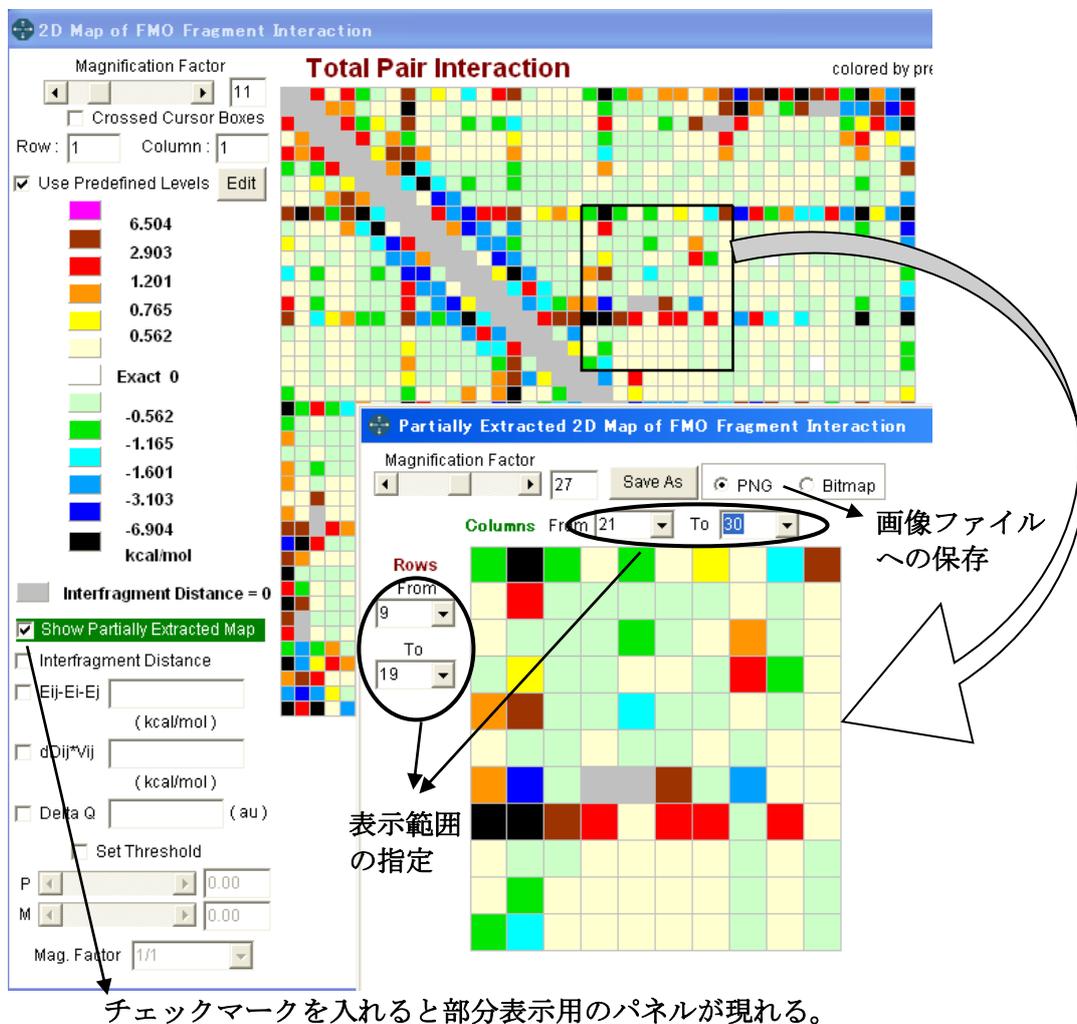
Find	Close Viewer	Close
1	Atom #	Atom
2	119	N
3	120	H
4	121	C
5	122	H
6	123	C
7	124	H
8	125	H
9	126	C

#145 の原子の近傍 6 Å にある原子を一つの PDB ファイルに保存する。

- 【Ver. 14.2.4】 March 19, 2010 バグ修正
- 【Ver. 14.2.3】 March 14, 2010 バグ修正と個々の機能の改良
- 【Ver. 14.2.2】 January 9, 2010 Firefly (PC GAMESS) 7.1.G に対応

【Ver. 14.2.1】 December 25, 2009

(1) PIEDA 2D マップの任意の部分の表示と画像ファイルへの保存機能



チェックマークを入れると部分表示用のパネルが現れる。

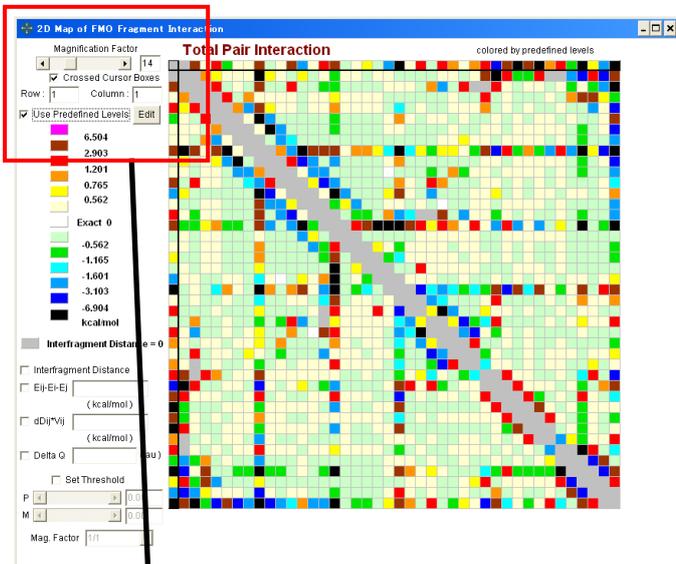
- (2) output から読み込んだ PIEDA の結果を読み込み可能なフォーマットで保存する機能
 FMO メニューの Save PIEDA in Gamess Output Format で保存できます。
 保存ファイル名の語尾には、Default で _PIEDA_ が付加されますが、これを変更したい場合は Facio. ini の SavePIEDA_Suffix を書き換えて下さい。

PIEDA の出力フォーマットは、GAMESS VERSION = 24 MAR 2007 (R1) と GAMESS VERSION = 24 MAR 2007 (R6) では若干異なりますが、ここでは R6 のフォーマットで保存します。

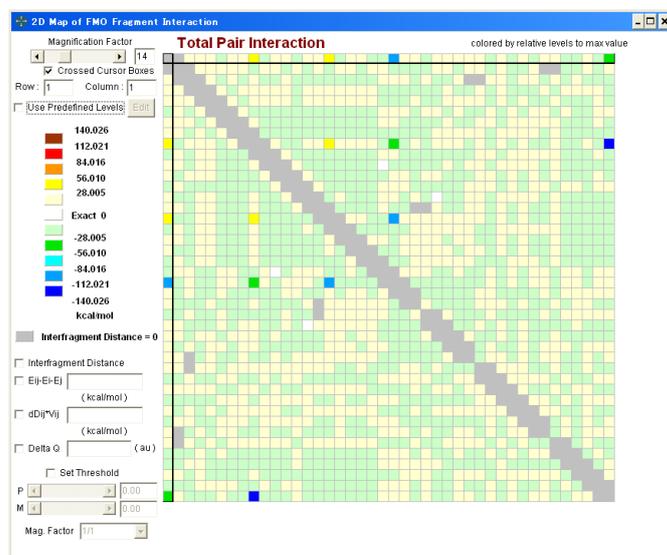
- (3) Closely Located Atoms Viewer を併用した近傍原子の編集機能

Closely Located Atoms Viewer は、中心原子と半径を指定することにより中心原子の近傍の原子を探して表示する機能ですが、この機能に分子モデルの編集機能（原子の削除、種類の変更、結合の生成と削除など）が加わりました。Edit メニューから編集モードを選択したのち、編集の対象となる原子の番号をテキストボックス Atom1, Atom2, Atom3, Atom4 に打ち込み、Execute ボタンをクリックして下さい。

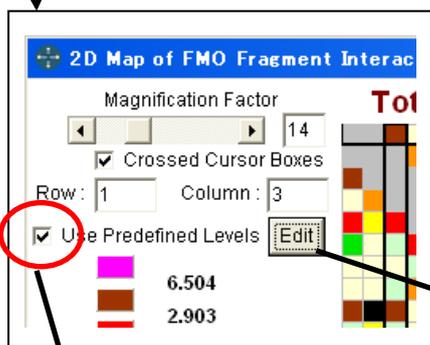
- (1) FMO 計算の Two-Body FMO Properties の二次元マップ表示法の改良
 色分け表示をするためのレベルの設定が自由にできるようになった。これにより、これまで見落としていたかもしれない小さな違いをよりはっきりと区別して見る事ができるようになった。



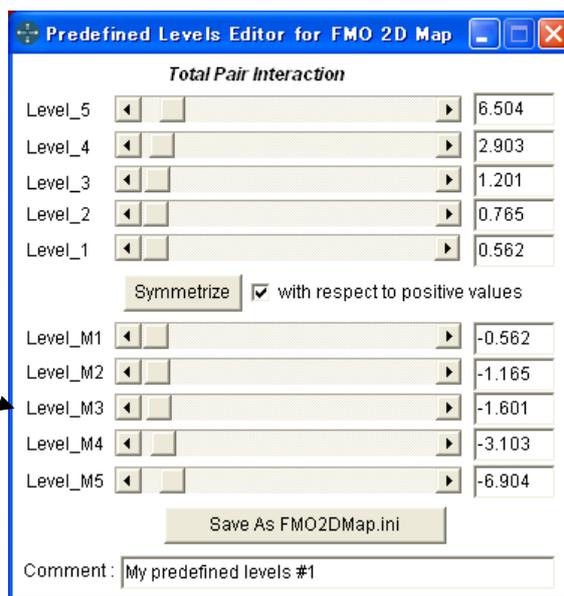
新しい表示法



これまでの表示法



色分け表示のためのレベルを予め定義したものを使用するか、相互作用の最大・最小値を基準にして等間隔に設定したレベルを使用するかを決めるチェックボックス



レベルを設定するためのエディタ
 現在 2Dマップに表示されている相互作用を色分けするレベルが変更の対象となる。

Symmetrize ボタンは、レベル値を正負で対称にするためのもの。

設定されたレベルは、Facio のルートフォルダ

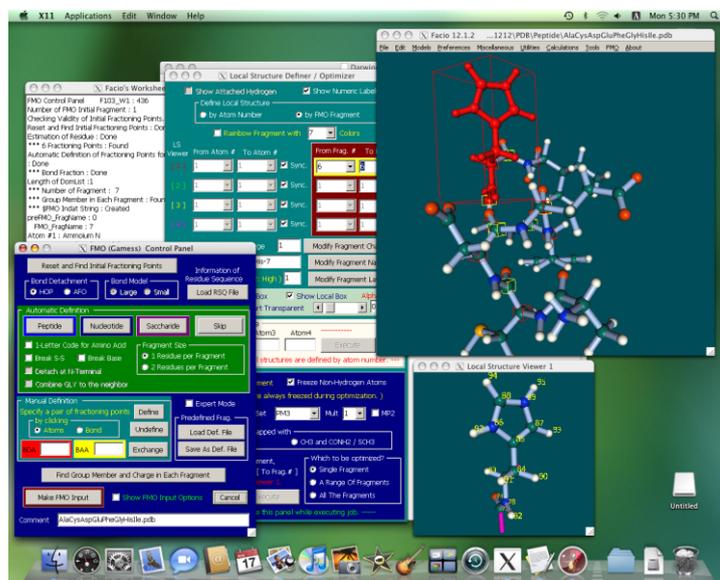
【Ver. 12.2.1】 September 12, 2009

固体表面など、非常に特殊な場合の FMO フラグメントの分割アルゴリズムを改良した。

【Ver. 12.1.3】 August 22, 2009

- (1) 水素原子が欠落している核酸の PDB データに ATOM レコードで水素原子を補完する機能を新たに作った。5' 末端や 3' 末端の水素も自動的に補完する。
PDB Utilities (Name Field Converter) も核酸に対応させた。
- (2) 水素結合の検出を行なうかどうかの初期値は、Facio.ini の SkipHBondDetection で決めるように変更した。
SkipHBondDetection=1 (検出を行なわない) SkipHBondDetection=0 (検出を行なう)
- (3) Polypeptide Builder で、非天然アミノ酸の Orn (Ornithine), Aib (Methylalanine), Pca (Pyroglutamic Acid) を使用することができるようにし、また、His では HE または HD のみに水素をつけた構造 (それぞれ Hie, Hid) が選択できるように変更した。
- (4) Darwine (Mac 用の Windows 互換レイヤー WINE) を使って Facio が Intel Mac 上で作動することを確認した。実行には Darwine の他に X11 for Mac OS X が必要だが、標準ではインストールされていないため、別途にインストールしなければならないことに注意。
VMWare Fusion や CrossOver Mac などのエミュレータと比べた場合の利点は、Windows のインストール CD が不要なことである。

Darwine <http://www.kronenberg.org/darwine/>



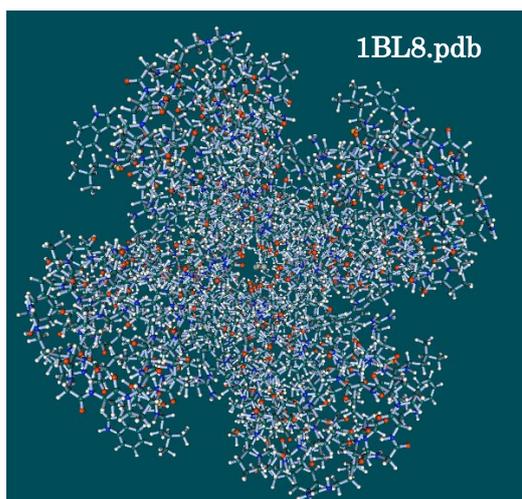
メイン画面の左右と下部にあるスライドボックスは表示されませんが、機能します。
ドラッグ&ドロップによるファイルの読み込みは、できません。
モニター平面内での分子モデルの平行移動は、ALT キーではなく Command キーを押しながらドラッグして下さい。但し、X11 の Input Preferences で「Emulate Three Button Mouse」のチェックをはずしておかなければなりません。

- (5) リモートホストの Gaussian をバッチジョブで使うための機能を大幅に改訂し、バッチジョブをコントロールするスクリプトをユーザーが指定する方式に変更した。
指定は、Facio.ini の [SSHConnection] セクションの BatchJobScript で行なう。スクリプトファイル名は、Facio のルートフォルダからの相対パスで記述する。例えば、Facio のルートフォルダにある JCF というフォルダ内の xxx.jcf をスクリプトとして使うなら、BatchJobScript=JCF¥xxx.jcf と設定する。

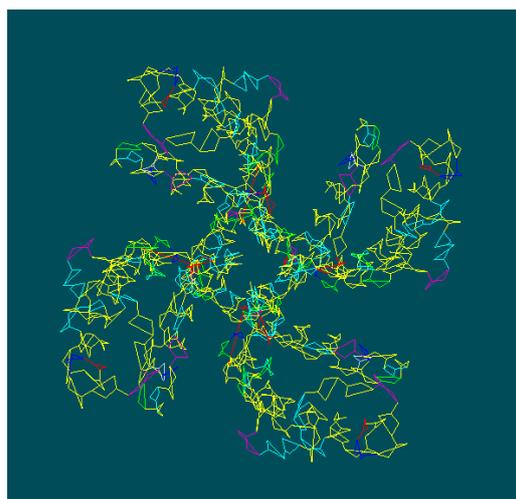
【Ver. 12.1.2】 July 13, 2009 バグ修正版

【Ver. 12.1.1】 June 27, 2009

- (1) プルダウンメニューの項目が多くなってきたので、サブメニュー化して整理した。
- (2) TINKER 5 に対応。Facio.ini の [AppControl] セクションの Tinker5 パラメータを 1 に設定する。TINKER 4.2 以前を使っている場合は、Tinker5=0 に設定する。
- (3) タンパク質の新しい粗視化表示法 (Trapezoidal Quad 表示)
一つのアミノ酸残基を 4 点 (アミドのカルボニルの酸素と炭素、 α 炭素、及びアミドの窒素) で表す表示法。アミノ酸の種類は、色で区別する。全部異なる色に設定することもできるが、デフォルトでは、疎水性、芳香族、酸性、塩基性というように、大まかに色分けしている。タンパク質の水素原子が欠落している場合には、水素原子を補完する必要がある。

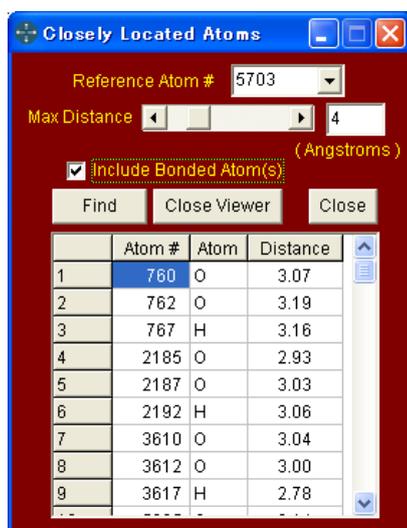


Ball & Stick モデル



Trapezoidal Quad モデル

- (4) 指定した原子の近傍にある原子を探し、それらを表示する機能



Reference Atom #: 5703
Max Distance: 4 (Angstroms)
 Include Bonded Atom(s)
Buttons: Find, Close Viewer, Close

	Atom #	Atom	Distance
1	760	O	3.07
2	762	O	3.19
3	767	H	3.16
4	2185	O	2.93
5	2187	O	3.03
6	2192	H	3.06
7	3610	O	3.04
8	3612	O	3.00
9	3617	H	2.78



1BL8.pdb に含まれる一つのカリウムイオンを中心にして、半径 4 Å 以内に存在する原子を表示している様子。

- (5) MOPAC2009/PM6 が対象としている H~Ba, La, Lu, Hf~Bi 全ての原子について、分子軌道の表示を可能にした。d 軌道のある原子については、d 軌道の表示を行なう。Facio と MOPAC2009/PM6 だけで作成した遷移金属錯体の分子モデルがサンプルとして MetalComplexes_by_PM6 というフォルダに置いてあります。

【Ver. 11.8.8】 March 27, 2009 バグ修正版

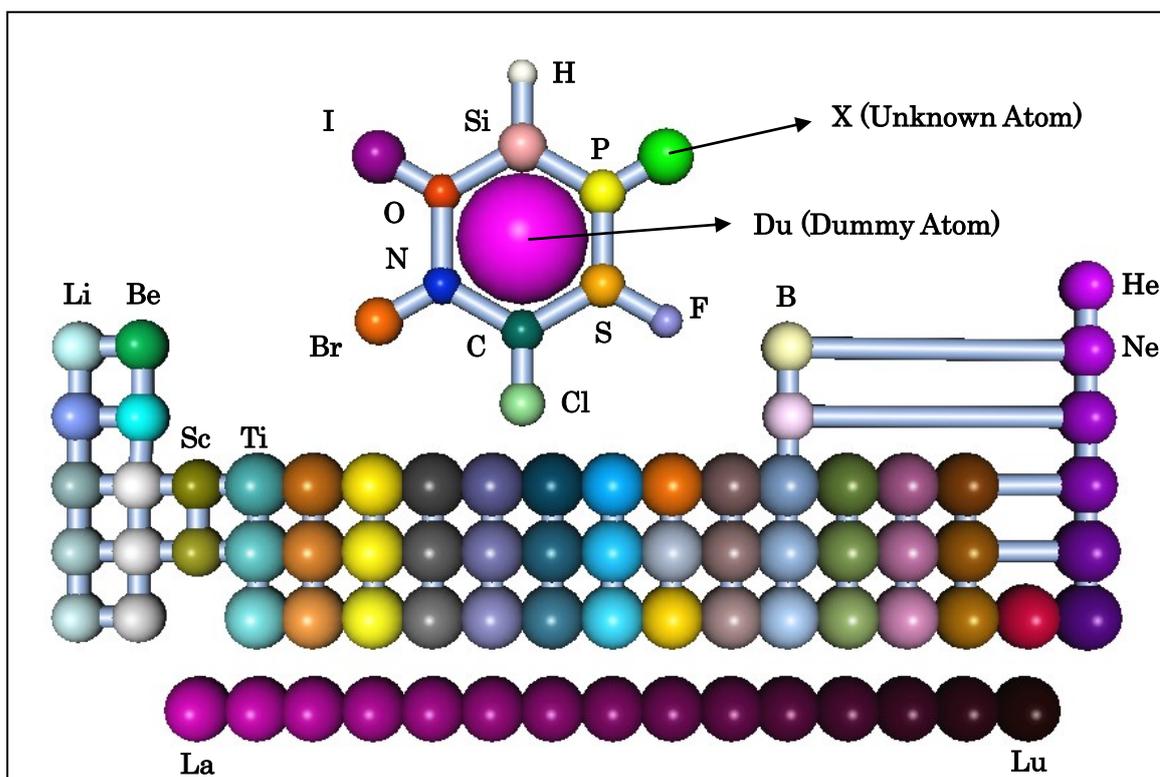
【Ver. 11.8.7】 March 25, 2009

- (1) Gamess (version January 12, 2009 R1)から実装された新しいFMO分割スキームであるAFO (Adaptive Frozen Orbital)法の入力ファイル作成に対応した。

AFOの参考論文

Dmitri G. Fedorov, Jan H. Jensen, Ramesh C. Deka, and Kazuo Kitaura
J. Phys. Chem. A 2008, *112*, 11808–11816

- (2) 全ての原子の色、玉の径などを変更できる機能を実装。これまで、H, C, N, O, F, P, S, Si, Br, Iの色や玉の径は、Facio.iniで設定していたが、これを廃止し、全ての原子についてAtomProp.iniで設定することにする。調整をする場合は、PDBフォルダに同梱されているAll_Elements_Colors.pdb (下図のような擬似分子)を使うとよい。



- (3) FMOフラグメントの名前を付ける際、大元のPDBファイルのResidue NameとResidue Numberを出来る限り保存して、使用できるようにした。これらの情報を保存するためのファイルとして、RSQ (Residue Sequence)というものを新たに定義した。RSQファイルの作成は、MiscellaneousメニューのHighlight PDB Residue Sequenceを参照のこと。
- (4) 分子の大きさに応じて自動的にズームを調整する機能
- (5) 2つのGamess/FMO計算の出力ファイルを読み込み、フラグメント間相互作用の差分を表示する機能
- (6) 有効コアポテンシャル型の基底関数SBKJCとHWを使用した場合は、電子の数が異なってくるため、HOMOの番号がずれてくる。この不具合に対処した。
- (7) Gamessの入力ファイルから分子の構造を読み取る機能。

- (1) GAMESS や Gaussian の出力した座標と結合情報を完全に保存するためのデータフォーマットを既存のものに求めたが満足いくものがなかったため、新たに FCC (Facio Cartesian Coordinate) というフォーマットを創設した。

下の例は、Gaussian で計算した H₂O の計算結果を FCC 形式で保存したものである。

Facio Cartesian Coordinate : C:\YG03W\Facio\H2O.out

3

O	1	0.0000000000	0.1146870000	0.0000000000	2	3
H	2	0.7540650000	-0.4587490000	0.0000000000	1	
H	3	-0.7540650000	-0.4587490000	0.0000000000	1	

1 行目には、「Facio Cartesian Coordinate」という文字列が必須。コロン以降には、コメントを書くことができる。2 行目は、原子の個数。3 行目以降は、原子の種類、通し番号、デカルト座標および結合情報が下記のフォーマットで記述されている。データは、全て右詰め。

A3, I7, 3(F17.10), n(I7) (ただし n は、結合の数で最大 8)

座標のフォーマットは少数点以下 10 桁に対応しているため、GAMESS や Gaussian の出力をそのまま保存することができ、また、結合情報が含まれているため、原子間距離をもとに結合の有無を判断したときに結合が欠落したりすることがないのが FCC の特徴である。従って、FCC (Facio Cartesian Coordinate) は、計算化学に適した新しいフォーマットである。

- (2) 結合をクリックすることにより、FMO 分割点の設定をすることができるようになった。結合の両端にある二つの原子のうちどちらかを BDA (Bond Detached Atom) にするかは自動的に判断される。
- (3) FMO 計算の出力ファイルの読み込みと同時に対応する入力ファイルも読み込み、座標データや FMO フラグメントの分割などの情報を取得する機能を付けた。従って、再度 Facio で分割することなく Local Structure Viewer でフラグメントを見ることが可能。
- (4) Facio.ini の新たな INI キー AddPause2Bat と UseFacioDriveLetter とともに、[AppControl] セクションにある。
AddPause2Bat は、Tinker-MM3 を起動するためのバッチファイル Facio.bat の最後に pause というコマンドを入れるかどうかを決めるためのもの。デフォルト値は、0
UseFacioDriveLetter は、Facio.ini の GamessBase や TinkerBase で設定されている Gamess や Tinker のドライブ名を無視して、Facio が存在するドライブ名を強制使用するためのもの。この機能は、大学の大型計算機センターのような環境で USB に入れた Facio から同じ USB に入れた Gamess や Tinker を使おうとする場合、ログインしたドライブがログイン毎に変化するような場合に対応するためである。
- (5) PC GAMESS と WinGamess の計算を Facio の子プロセスで起動した場合の構造最適化の収束の様子をより簡単に見るための Monitor Energy Conv. ボタンを Gamess のコントロールパネル内に作った。
- (6) Tinker-Amber, Charmm, Oplsaaal 計算の入力ファイルの作成と同時に、計算の起動に必要なバッチファイルと key ファイルが自動的に作成されるようにした。

【Ver. 11.8.5】 November 8, 2008

- (1) MO の係数から MO ロープを描画するのに、これまで 1 Å あたり 10 点の格子を使っていたが、これを変更し、1 Å あたりの格子点の数を変更できるようにした。合わせて、\$VEC/Molecular Orbital Viewer の Surface Thickness と Isosurface Value のデフォルト値をそれぞれ 0.012 と 0.03 に変更し、MO のロープが見やすいようにした。
- (2) 結合をクリックすることにより FMO の分割点が設定できるようにした。結合の両端にある 2 つの原子のうちどちらかを BDA にするかは、原子の種類と sp³ であるかどうかで自動的に判断する。BDA (Bond Detached Atom) と対となる原子を交換するボタンも作った。
- (3) マウスによる回転を改良した。
- (4) ALT キーを押しながらマウสดラッグすると、モニター平面内を平行移動する機能を付けた。マウスの動きに対する感度は、Facio.ini の TransSens で調整できる。
- (5) 元素の周期表を改訂した。
- (6) MOPAC ver. 7.101 と ver. 8.211 では、NORMAL COORDINATE ANALYSIS のフォーマットが EIGENVECTORS と同じように、全く異なることが判明したので、これに対応した。

(MOPAC Ver. 7.101)

NORMAL COORDINATE ANALYSIS

Root No.	1	2	3	4	5	6	7	8
	1 E2u	1 E2u	1 B1g	1 E2g	1 E2g	1 A2u	1 E1g	1 E1g
	341.2	341.2	582.1	589.4	589.4	768.9	899.2	899.2
1	0.0000	0.0000	0.0000	-0.0039	0.0714	0.0000	0.0000	0.0000
2	0.0000	0.0000	0.0000	-0.0804	0.0655	0.0000	0.0000	0.0000
3	-0.0442	-0.0581	-0.0415	0.0000	0.0000	0.0129	-0.0326	-0.0019
4	0.0000	0.0000	0.0000	-0.0159	0.0698	0.0000	0.0000	0.0000
5	0.0000	0.0000	0.0000	-0.0593	-0.0855	0.0000	0.0000	0.0000

(MOPAC Ver. 8.211)

MASS-WEIGHTED COORDINATE ANALYSIS (NORMAL COORDINATES)

Root No.	1	2	3	4	5	6	7	8
	1 E2u	1 E2u	1 E2g	1 E2g	1 B1g	1 A2u	1 B2u	1 E1g
	367.0	367.0	591.5	591.5	598.7	800.0	916.0	922.6
1	0.0001	-0.0003	0.3155	0.0079	0.0002	0.0001	-0.1976	0.0001
2	-0.0003	0.0005	0.2970	0.3506	-0.0004	-0.0001	-0.3423	0.0001
3	-0.2190	0.4121	-0.0002	-0.0004	-0.3130	-0.1136	0.0005	-0.0315
4	0.0002	0.0003	0.3091	0.0638	-0.0002	0.0001	-0.1977	-0.0001
5	-0.0003	-0.0005	-0.3687	0.2742	0.0004	-0.0001	0.3423	0.0001

【Ver. 11.8.4】 October 4, 2008

- (1) Gamess/FMO 計算の出力ファイルの読み込みも Drag&Drop 対応にした。
- (2) Gaussian で、Opt Freq の計算を行い基準振動を読み込むと最適化された構造ではなく、初期構造を読み込むことがわかったので、最適化された構造が読み込まれるように修正した。
- (3) WinGamess では、MAXIT の上限は、200 になっているが、設定パネルでは、300 が選択できるようになっているのでこれを修正。PC GAMESS では、MAXIT=300 は、O.K. である。
- (4) QST2 および QST3 のコメント行が全て Reactant のものと同じになるのを修正。
- (5) IRC Data Viewer を起動すると CPU がフル回転状態になるが、そうならないようにした。IRC Data Viewer で、表示される原子の位置とマウスクリックに反応する原子の位置が異なることがわかった。表示の仕方を変更して、上の不具合に対処した。Trajectory Viewer でも同様の不具合があったので同様の対処をした。
- (6) MOPAC ver. 7.101 と ver. 8.211 では、EIGENVECTORS のフォーマットが以下のように全く異なることが判明したので、これに対応した。

(MOPAC Ver. 7.101)

Root No.	7	8	9	10	11	12	13	14		
	1 b2u	1 blu	2 elu	2 elu	1 a2u	2 e2g	2 e2g	1 elg		
	-15.732	-15.068	-14.200	-14.195	-13.161	-11.940	-11.936	-9.639		
S	C	1	-0.2149	0.0001	-0.0704	-0.0023	0.0000	0.0112	-0.0005	0.0000
Px	C	1	0.0000	-0.4079	0.0040	-0.1309	0.0000	0.0191	0.3594	0.0000
Py	C	1	-0.2241	-0.0001	0.4662	0.0148	0.0000	0.3397	-0.0182	0.0000

(MOPAC Ver. 8.211)

Root No.	7	8	9	10	11	12	13	14		
	1 b2u	1 blu	2 elu	2 elu	1 a2u	2 e2g	2 e2g	1 elg		
	-15.730	-15.067	-14.197	-14.196	-13.160	-11.941	-11.933	-9.638		
S	C	1	-0.2146	-0.0002	-0.0014	-0.0702	0.0002	0.0002	-0.0110	-0.0004
Px	C	1	0.0000	0.4090	-0.1275	0.0019	-0.0013	0.3595	0.0059	0.0011
Py	C	1	-0.2233	0.0004	0.0085	0.4667	0.0007	0.0055	-0.3402	-0.0017
Pz	C	1	0.0008	0.0009	-0.0002	-0.0015	0.4083	0.0014	0.0004	-0.5319

【Ver. 11.8.2, 11.8.3】 August 19, 27, 2008

本バージョンは、11.8.1 と 11.8.2 の小さなバグを修正したものです。

【Ver. 11.8.1】 July 25, 2008

- (1) 構造最適化や遷移状態探索の途中の構造の読み込みとアニメーションによる連続表示。GAMESS や Gaussian の出力だけでなく、GAMESS/FMO の構造最適化にも対応。計算が終了していないファイルの読み込みも可能。
MP2 計算の結果に対しては、MP2 エネルギーを別に読み込み表示する。
各構造は、Facio のルートフォルダの PDB 中の OptResults というフォルダに、Opt_1.pdb, Opt_2.pdb, Opt_3.pdb... というファイル名で保存される。
- (2) 複数の構造を読み込み、それぞれの結合長、結合角、二面角のリストを連続的にテキストファイルにして保存する機能。 Utilities メニューの Load File(s) and Dump Geometric Informations を選択すると読み込み用のパネルが現れる。
読み込み可のファイルは、(PDB, CCl, Free formatted / WebLab xyz, MDL mol, Tripos mol2, Tinker XYZ, GAMESS output, Gaussian output)
- (3) タンパク質のポイントミューテーション機能

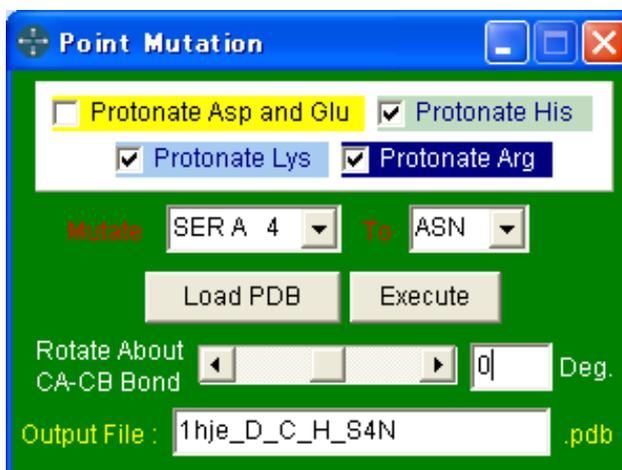
ATOM レコードのタンパク質の PDB ファイルを読み込み、アミノ酸残基の側鎖を指定した別のアミノ酸残基のものに変更し、ATOM レコード形式の PDB ファイルとして保存する。その際、原子の番号の付け替えは、自動的に行われる。また Cys-Cys の S-S 結合を示す CONECT レコードがある場合は、この番号も書き換える。新たな残基が Glu, Asp, His, Lys, Arg の場合には、プロトン化するか否かの選択ができる。アミノ酸残基によっては、側鎖が、近傍のペプチド鎖にぶつかることがあるが、この場合には $C\alpha-C\beta$ 軸の周りの回転角度を適当に指定することにより回避できることが多い。

Cys-Cys の一つの Cys を別のアミノ酸残基に置き換える場合には、対となっていた Cys に水素原子を付け、相当する S-S 結合の CONECT レコードを削除する。

Pro を別のアミノ酸残基に置き換える場合は、窒素に水素原子を付加する。N-端の場合は、水素原子を二個付加する。新たな残基が Pro の場合は、N-H の水素を削除し五員環を作るが、元の構造によっては歪のある環構造になることもある。この場合も、 $C\alpha-C\beta$ 軸の周りの回転角度を適当に指定することにより、環構造の調整が可能である。

保存される PDB ファイルの名前には、元のアミノ酸残基と新しいアミノ酸残基の一文字表記をもとにした接尾辞が自動的に付与される。例えば Ser 4 を Asn に変更した場合には、_S4N が元の PDB ファイル名に付与される。

フォルダ Point_Mutation の中に Point Mutation のサンプルがある。



- (4) FMO 計算 Two-Body FMO Properties の二次元マップ表示の改良
- (5) Rainbow Fragment 表示で使用できる色の上限を 16 色まで増やし、2 ~ 16 色の範囲で使用する色を設定できるようにした。
- (6) TINKER-OPLSAAL 入力ファイルの作成機能

(1) FMO 計算の Two-Body FMO Properties を二次元マップで表示する機能



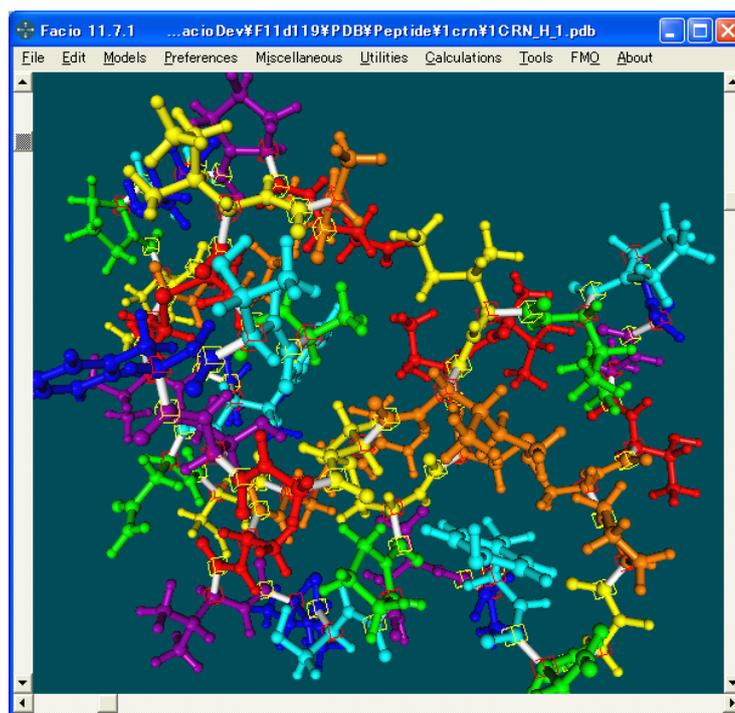
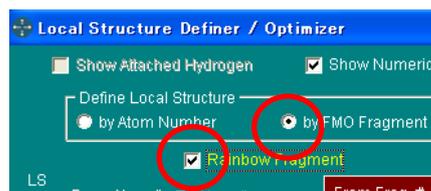
PIEDA でない計算の Two-Body FMO Properties の読み込みも可能となった。

(2) Rainbow Fragment 表示

メイン画面の分子モデルに対して、FMO フラグメント毎に色を変えて表示する機能。使用する色は、赤、橙、黄、緑、水色、青、紫の7色で、分割される結合は、白で表示される。

【使用法】

FMO フラグメントをまず作る。次に Local Structure Viewer で「by FMO Fragment」を選択し、Rainbow Fragment にチェックを入れると右図のような表示になる。



(3) TINKER-CHARMM 入力ファイルの作成機能

(4) ATOM レコードによる水素補完の際に、既存の CONECT レコードの番号を自動的に付け替えて保存する機能

(1) PDB ユーティリティ (FMO メニューにあります)

(A) ATOM レコードの Alternate Location を削除する機能

	1	2	3	4			
	123456789012345678901234567890123456789012345	(Columns)					
ATOM	18	CD1	ATYR A	327	16.886	14.518	-8.371
ATOM	19	CD1B	ATYR A	327	14.840	15.316	-5.413
ATOM	20	CD2	ATYR A	327	15.466	14.119	-6.496
ATOM	21	CD2B	ATYR A	327	16.667	14.101	-6.351

Alternate Location Indicator

ATOM	18	CD1	ATYR A	327	16.886	14.518	-8.371
ATOM	20	CD2	ATYR A	327	15.466	14.119	-6.496

(B) ATOM レコード Atom Name Field のフォーマット変換機能

ATOM	24	HB2	TYR A	2	-5.189	-0.788	-1.616
ATOM	25	HB3	TYR A	2	-4.918	0.937	-1.380
...							
ATOM	104	HG21	THR A	8	0.813	-5.501	-2.562
ATOM	105	HG22	THR A	8	2.533	-5.563	-2.176
ATOM	106	HG23	THR A	8	1.885	-4.210	-3.104

ATOM	24	1HB	TYR A	2	-5.189	-0.788	-1.616
ATOM	25	2HB	TYR A	2	-4.918	0.937	-1.380
...							
ATOM	104	1HG2	THR A	8	0.813	-5.501	-2.562
ATOM	105	2HG2	THR A	8	2.533	-5.563	-2.176
ATOM	106	3HG2	THR A	8	1.885	-4.210	-3.104

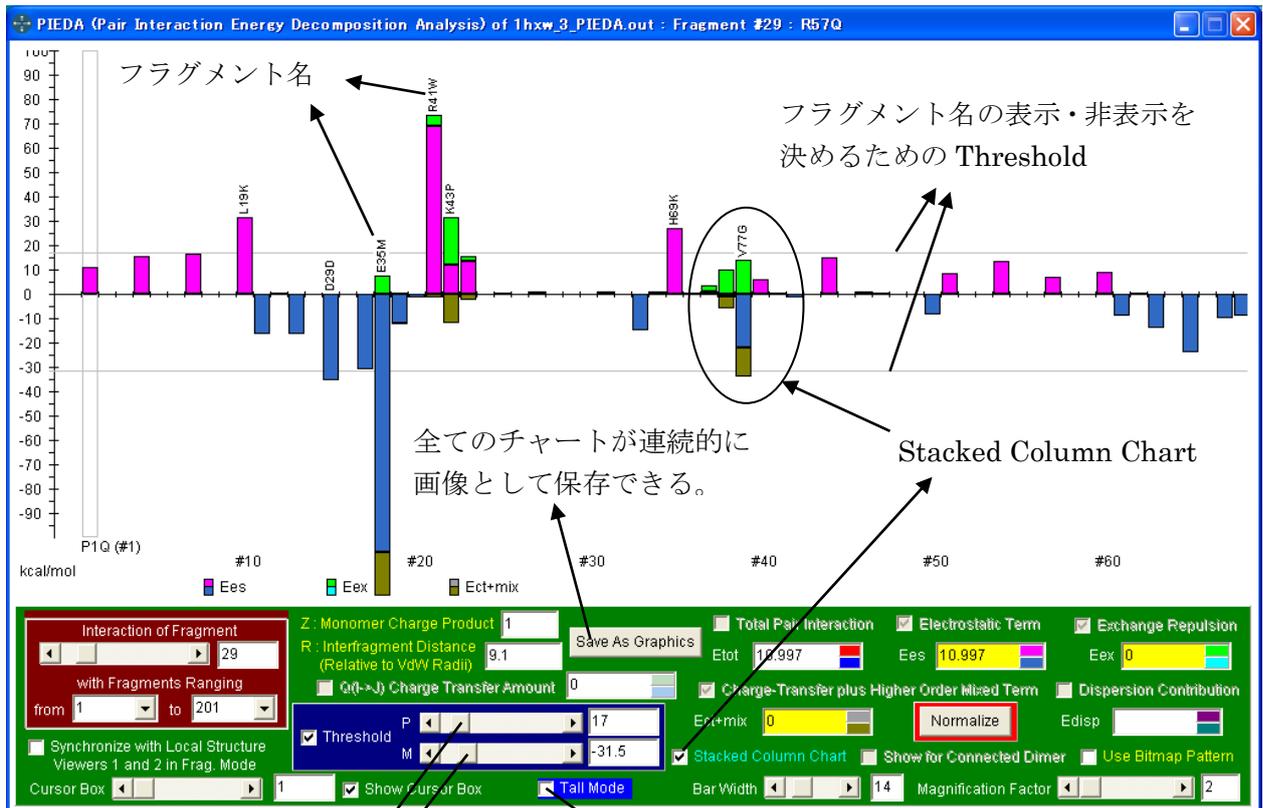
(C) タンパク質に対して ATOM レコードによる水素原子の補完を行なう機能

ATOM	1	N	PRO A	1	8.316	21.206	21.530
ATOM	2	CA	PRO A	1	7.608	20.729	20.336
ATOM	3	C	PRO A	1	8.487	20.707	19.092
ATOM	4	O	PRO A	1	9.466	21.457	19.005
ATOM	5	CB	PRO A	1	6.460	21.723	20.211
ATOM	6	CG	PRO A	1	7.110	23.002	20.661
ATOM	7	CD	PRO A	1	7.873	22.569	21.889

ATOM	1	N	PRO A	1	8.316	21.206	21.530
ATOM	2	CA	PRO A	1	7.608	20.729	20.336
ATOM	3	C	PRO A	1	8.487	20.707	19.092
ATOM	4	O	PRO A	1	9.466	21.457	19.005
ATOM	5	CB	PRO A	1	6.460	21.723	20.211
ATOM	6	CG	PRO A	1	7.110	23.002	20.661
ATOM	7	CD	PRO A	1	7.873	22.569	21.889
ATOM	8	1H	PRO A	1	9.407	21.194	21.355
ATOM	9	2H	PRO A	1	8.144	20.515	22.375
ATOM	10	HA	PRO A	1	7.255	19.678	20.535
ATOM	11	1HB	PRO A	1	5.606	21.397	20.832
ATOM	12	2HB	PRO A	1	6.082	21.739	19.173
ATOM	13	1HG	PRO A	1	6.341	23.772	20.853
ATOM	14	2HG	PRO A	1	7.744	23.411	19.853
ATOM	15	1HD	PRO A	1	7.219	22.614	22.778
ATOM	16	2HD	PRO A	1	8.698	23.275	22.092

(2) 分割点の無いような系 (例えば、水分子の集合体など) や 孤立原子があるような系に対して、FMO フラグメントの作成が可能になった。

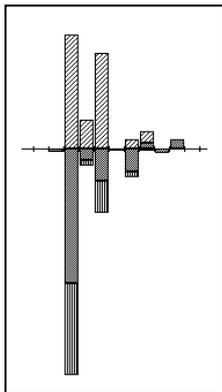
(1) FMO の PIEDA 可視化パネルの改良



Threshold 設定用のスライドボックス

画面の縦がほぼ2倍になる Tall Mode

エネルギーの棒グラフの表示をカラーではなくビットマップパターンで表示することも可能



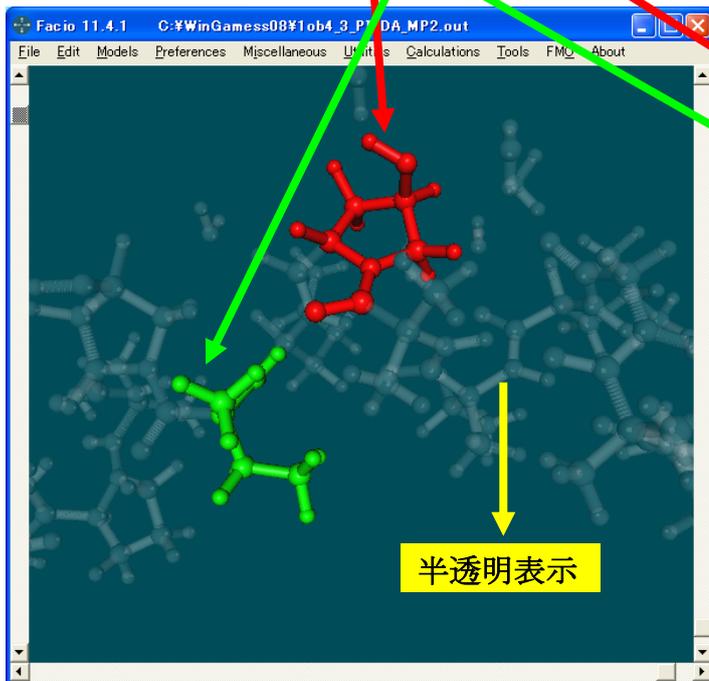
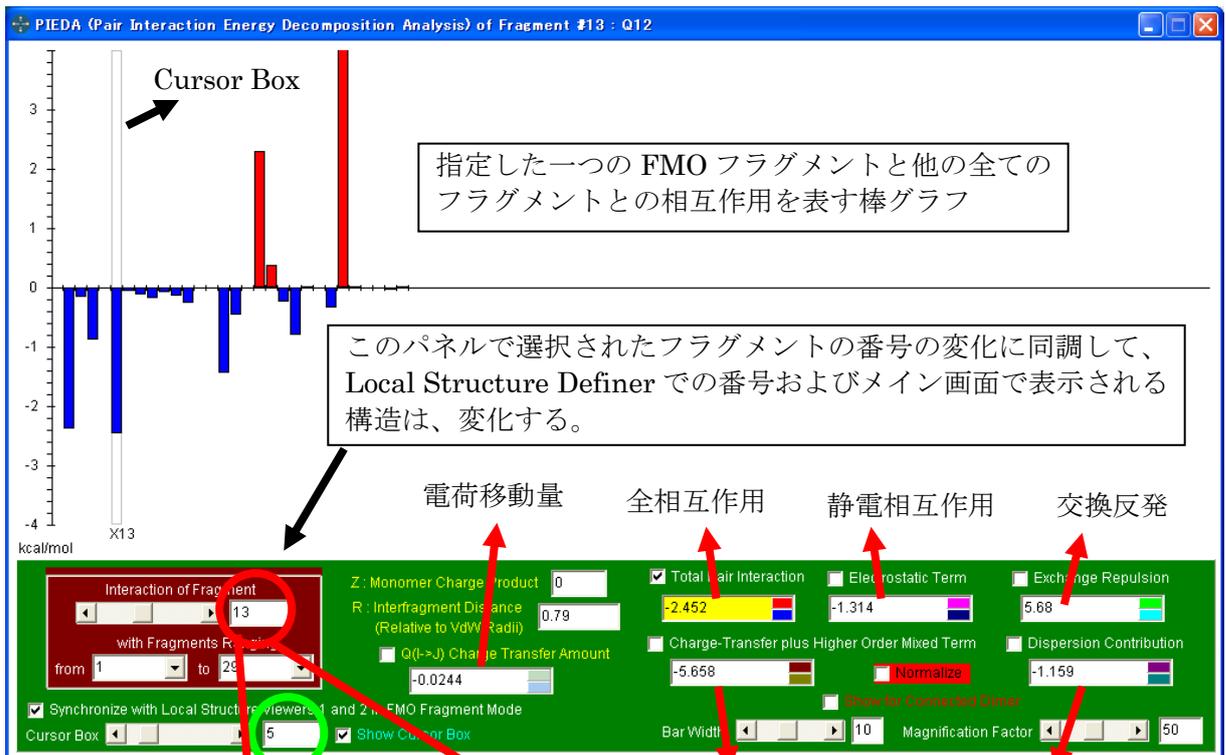
使用しているビットマップファイルは、フォルダ Brush_BMP に入っており、ファイル名には以下のような対応がある。

BM-1. bmp	Total Pair Interaction
BM-2. bmp	Electrostatic Term
BM-3. bmp	Exchange Repulsion
BM-4. bmp	Charge-Transfer plus Higher Order Mixed Term
BM-5. bmp	Dispersion Contribution

8 x 8 のビットマップなので、ユーザーによる入れ替えが可能である。

- (2) 特殊な(A)-B-(C)-D の形の FMO フラグメント化もできるようにした。
ここで(A)と(C)は、BDA(Bond Detached Atom) Expert Mode で使用できる。
- (3) OpenGL 用のヘッダファイルを変更 (Windows Vista に対応するため)
- (4) CIF ファイルの読み込み
- (5) Gaussian IRC の構造を表示する順序の問題を修正
- (6) 複数のスクリーンショットを保存する場合のフォルダ設定用の GUI を変更
- (7) アウトラインフォントによるラベルの表示
- (8) TER レコードのある PDB を HETATM/CONNECT 形式の PDB に保存する場合の動作の変更

(1) FMO の PIEDA (Pair Interaction Energy Decomposition Analysis) を可視化するパネル



電荷移動相互作用 分散相互作用
Cursor Box の示すフラグメントとの相互作用エネルギーが数値で表示される

Local Structure Definer / Optimizer

Show Attached Hydrogen Show Numeric Labels

Define Local Structure
by Atom Number by FMO Fragment

LS Viewer	From Atom #	To Atom #	Sync	From Frag. #	To Frag. #
[1]	1	1	<input checked="" type="checkbox"/>	13	13
[2]	1	1	<input checked="" type="checkbox"/>	5	5
[3]	1	1	<input checked="" type="checkbox"/>	3	1
[4]	1	1	<input checked="" type="checkbox"/>	4	1

Estimated Fragment Charge 0 Modify Fragment Charge
Fragment Name Gly-2 Modify Fragment Name
Fragment Layer (1: Low, 2: High) 1 Modify Fragment Layer

Show Fractioning Point Box Show Local Box Alpha Value
 Make the Unselected Part Transparent Alpha Value 0.1

選択されていないフラグメントを半透明にする

(2) Facio 11.3.1 では、PIEDA 計算の入力ファイルに誤りがあったので計算ができません。

(3) TINKER-AMBER の入力ファイルの自動作成機能
同梱されている Tinker-Amber フォルダにサンプルと説明があります。

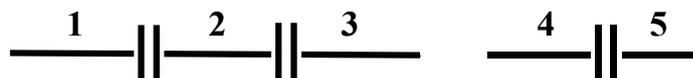
【Ver. 11.3.1】 February 10, 2008

(1) FMO フラグメント化アルゴリズムの改良

複数のペプチド鎖がある場合、Ver. 11.2.1 までのアルゴリズムではフラグメントの番号が、二つの鎖にまたがって付けられていたが、



これを改良して、フラグメント番号が一つの鎖で連続になるようにした。



(2) FMO 入力オプションの拡張

糖鎖の自動分割

PCM 計算の設定

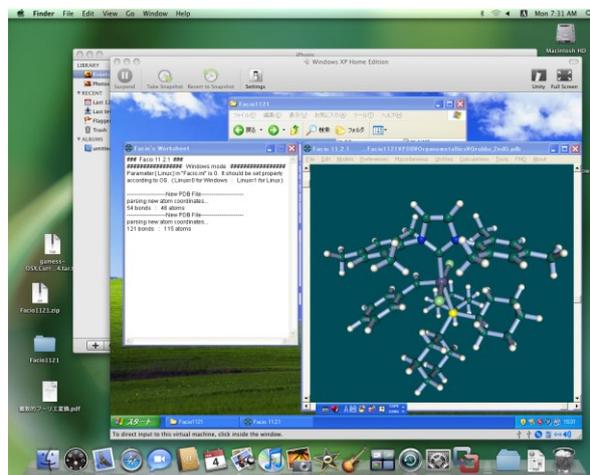
並列計算の設定

High-Layer のオプション設定

レイヤーの設定は、Local Structure Viewer のコントロールパネルで行なう。

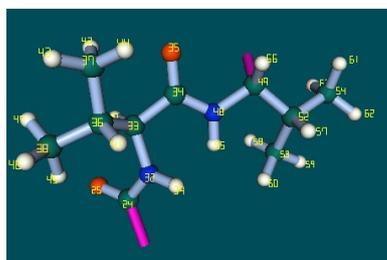
(3) Macintosh 上での動作を確認

Facio は、Intel 社の CPU を持つ Mac の Windows の環境で動かすことができる。右のスクリーンショットは、VMWare Fusion を使っているときのものである。Facio では、VMWare Fusion を推奨する。この他、CrossOver Mac 6.21 でも動かすことが可能であるが、メニューバーと左右下部のスライドボックスが表示されないという不具合がある。単に表示されないだけで、プルダウンメニューは表示され機能する。



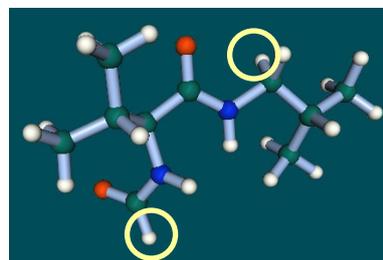
(1) FMO (Games) フラグメントの構造最適化機能

分子軌道法を使ってフラグメントの構造最適化を行なう。その際、分割点の座標は常に固定されている。フラグメント内の水素原子は常に最適化され、非水素原子はオプションで最適化することもできる。計算は、1つのフラグメント、あるいは指定する範囲の一連のフラグメント、もしくは全てのフラグメントに対して連続的に行なわれ、各フラグメントの計算終了後直ちに全体の分子モデルに結果が適用される。計算の際、分割点の原子に付与するキャップは、水素原子、もしくは下記に示すような置換基が選択できる。

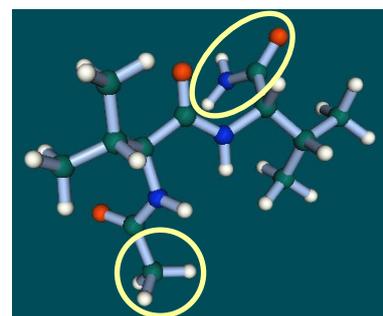


切り出したフラグメント
赤紫色の結合が分割された結合

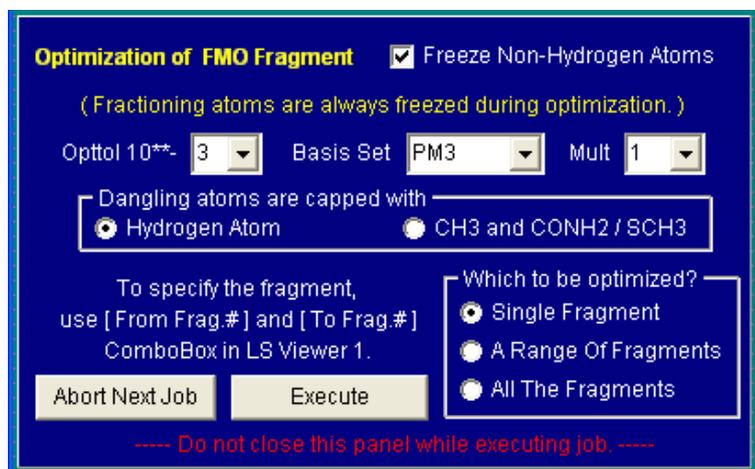
水素原子でキャップ



置換基で
キャップ



カルボニルには CH_3 を、
 α 炭素には、 CONH_2 を付与



どの範囲のフラグメントに対して最適化を行なうかを選択するラジオボタン。フラグメントの選択は、Local Structure Viewer 1 を使う。

(2) S-S 結合が分割点になる場合に必要な混成軌道

前バージョンでは、これが無いためにエラーが起きました。STO-3G と MINI のものは、京都大学大学院薬学研究科の北浦先生のご好意により作成して頂き、3-21G, 6-31G, 6-31G(d)のものについては末永が作成したものです。前者は、 H_2S_2 分子の Gaussian による NLMO を基に作成され、後者は、 SH_2 分子の GAMESS による Edmiston-Ruedenberg LMO を基に作成しました。

(3) FMO フラグメント定義ファイル

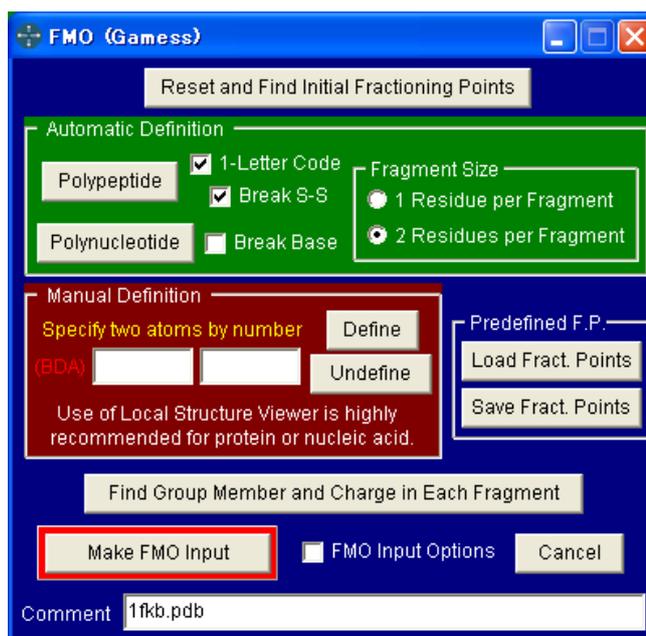
マニュアルで分割点を設定した場合や、自動的に設定されたフラグメントの電荷に誤りがあり、これを修正した場合、または、自動設定されたフラグメントの名前を変更した場合、これらの情報を全て保存することのできるファイル形式を定義した。このファイルを読み込むことで、再度マニュアルによるフラグメントの修正は不要となり、作業が楽になる。

【Ver. 11.1.1】 October 2, 2007

(1) FMO (Games) のための GUI

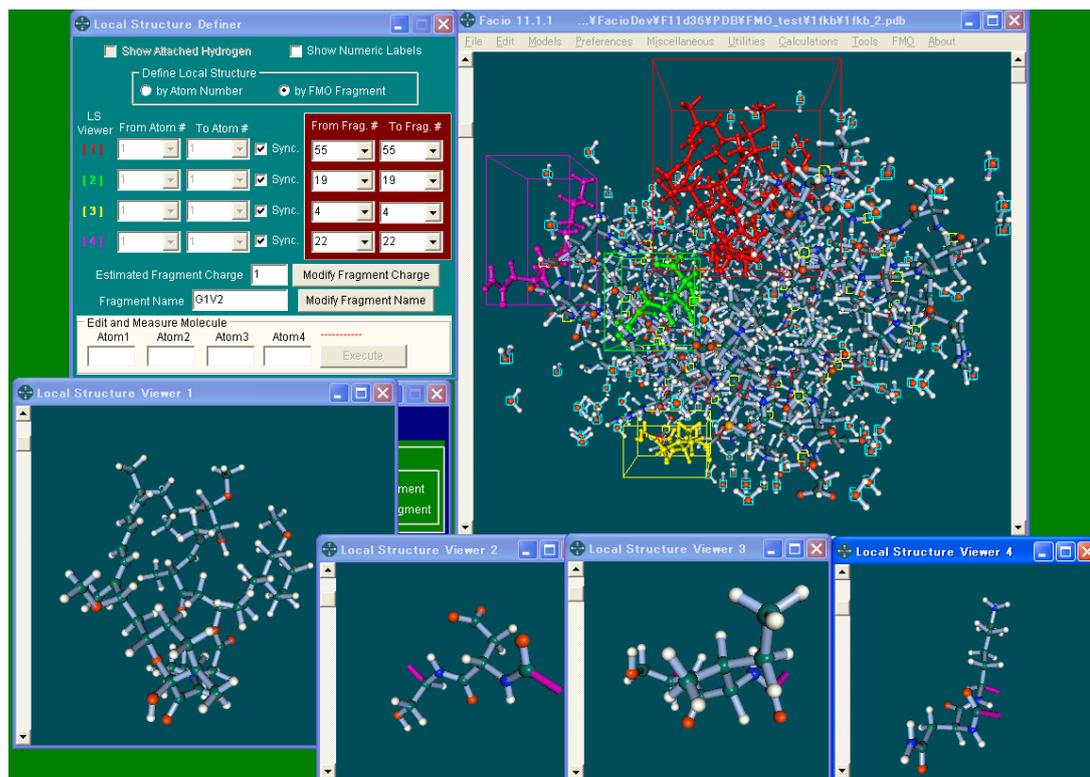
FMO フラグメントの自動・手動分割が自由にできる。ポリペプチドやポリヌクレオチド部分は通常自動分割を用い、それ以外の部分（例えばタンパク質 - 阻害剤複合体の阻害剤部分など）には手動分割を用いる。

FMO 入力ファイルの自動作成機能では、各フラグメントの電荷の設定およびアミノ酸残基をもとにしたフラグメント名と各フラグメントに含まれる原子の番号 (INDAT 配列) の自動生成を行なう。



(2) タンパク質のような複雑で巨大な分子の部分構造をみるための機能

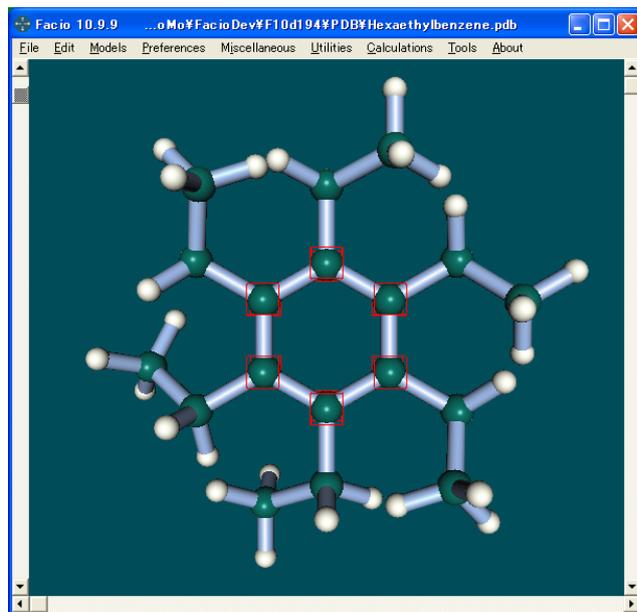
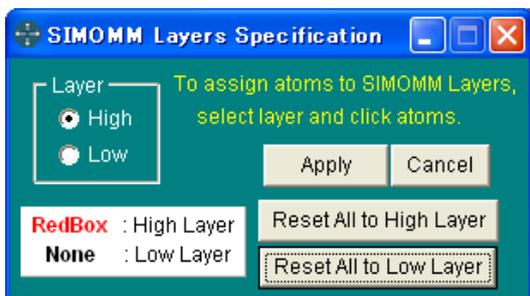
原子の番号または FMO フラグメント番号で指定した部分構造を表示する。4つの独立したサブウィンドウが使用できる。この機能により、巨大な分子の編集（水素原子の付加や削除、結合長や結合角の変更、結合の生成や削除など）が容易になる。



上の図は、1fkb.pdb (Rapamycin-FKBP12 複合体) の FMO フラグメント 55、19、4、22 番を表示させている様子。Viewer1, 2, 3, 4 に表示される部分構造は、メイン画面上の全体構造では、それぞれ赤色、黄緑色、黄色、赤紫色で表示される。

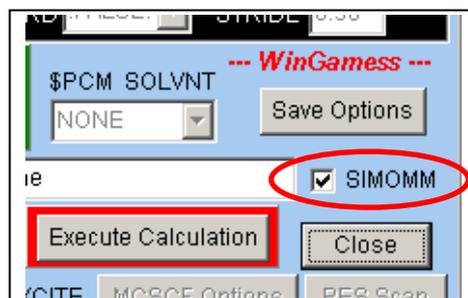
【Ver. 10.9.9】 July 22, 2007

(1) SIMOMM レイヤーの設定と WinGamess/Tinker SIMOMM 計算用入力ファイルの自動作成



Calculations メニューの SIMOMM Layer を選択すると上のようなパネルが現れる。この状態でクリックされた原子は、赤い箱枠で囲まれ SIMOMM の High レイヤーに設定される。(右の例では、ヘキサエチルベンゼンの芳香環炭素が High レイヤーに設定されている。) 赤い箱枠で囲まれていない原子は、Low レイヤーに設定される。

次に WinGamess の入力オプションパネルを開き、SIMOMM にチェックマークを入れ計算を開始すると WinGamess と Tinker (MM3) による QM/MM 計算が行われる。MM3 の原子タイプの設定や SIMOMM 計算に必要な設定など、入力ファイルは自動的に作成される。



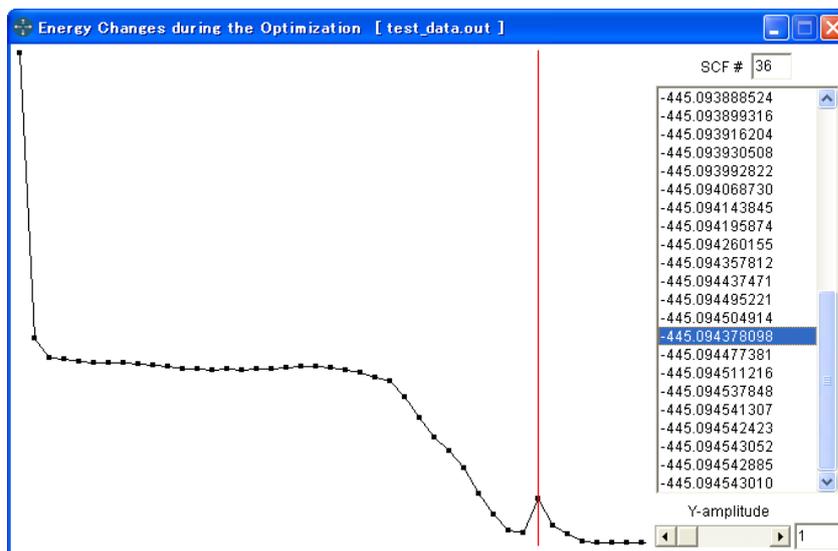
SIMOMM 計算の Bulk Model (QM/MM 全体のモデル) の読み込みは、File メニューの Load New WinGamess Output for Bulk Model in SIMOMM Calc. で行なう。通常の Gamess の output の読み込みでは、QM 部分のモデルのみが読み込まれる。

- (2) 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起動するバッチユーティリティ (WG_DDE.bat) を新たにリリースした。9 個までのファイルをドラッグ&ドロップすることができ、これらを連続して実行することができる。既にリリースしていた PC GAMESS 用もバージョンアップし、PCG_DDE.bat と改名した。
- (3) Multi Display および Multi MO において、マルチ画面をクリックするとその画面の構造もしくは分子軌道のローブがメイン画面に表示される機能を実装した。
- (4) 基準振動のアニメーション表示で、原子の動きが平衡位置に対して対称になるように変更した。これに伴い、Frames per half cycle の値は奇数に制限した。
- (5) BondCriterion と HX_Max のデフォルト値をこれまでの 1.9 と 1.3 からそれぞれ、2.1 と 1.5 に変更した。

(1) 構造最適化におけるエネルギー変化をグラフで表示。

SCF 計算のエネルギーが振動したりなどしてなかなか収束しない場合があるが、そのような状況を早く見つけて対処するためのツール。

GAMESS および Gaussian の構造最適化計算の出力ファイル (計算の途中で可) を読み込んだ後、Miscellaneous メニューの「Summarize Energy Changes During Optimization」を選択すると、下のようなパネルが現れエネルギー変化が表示される。Y-amplitude の値を大きくすると、変化の小さな部分が拡大して表示される。



右辺のボックス内のエネルギー値をクリックすると、対応する箇所に赤色の垂直線が表示される。ボックス内でドラッグすることにより、垂直線も同時に移動する。

- (2) Gaussian 94, 90 の出力フォーマットは、Gaussian 98, 03 のそれと異なりますが、少なくとも座標データだけは、読み込めるようにしました。他のデータについては、テスト用の出力ファイルがないので、未確認です。
- (3) PC GAMESS の入力ファイルをドラッグ&ドロップすることにより計算を開始することのできるバッチファイル DDEG6. bat がバージョンアップし、9 個までの入力ファイルを連続して実行できる Multi_DDEG3. bat になりました。

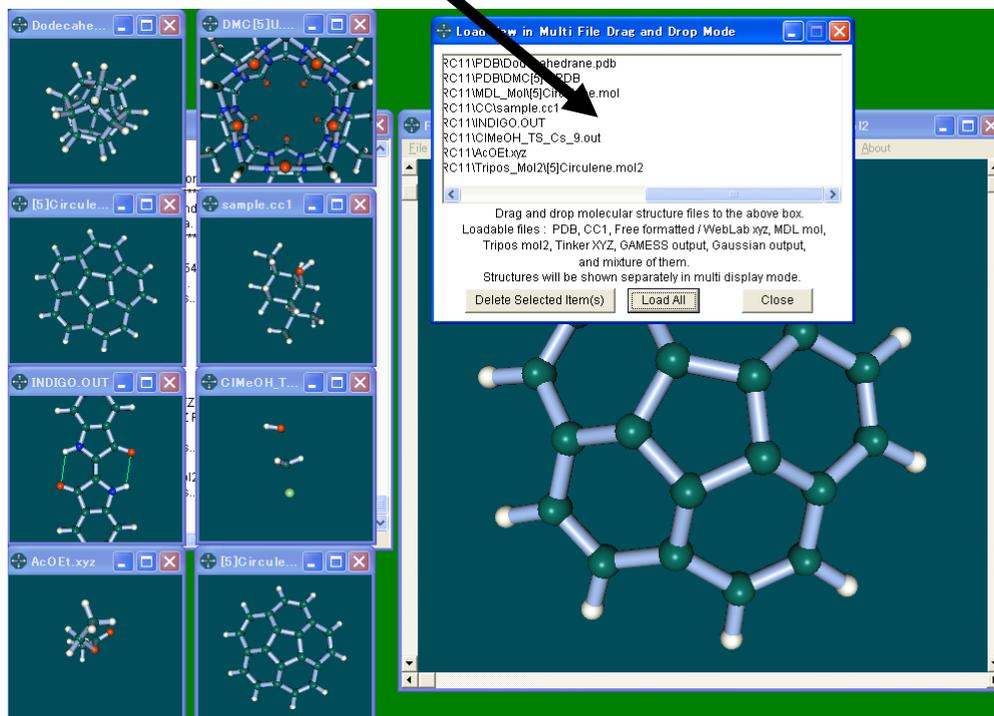
Facio 10.9.9 以降では、
PCG_DDE.bat (PC GAMESS 用)
WG_DDE.bat (WinGamess 用)
になりました。

↑
Multi_DDEG3.bat



(1) 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個のファイルを読み込み、それぞれ別のウィンドウに表示する機能をつけました。読み込み可能なファイル形式は、PDB, CC1, 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 (*.out)の8種類です。下のスクリーンショットは、8種類のファイルを同時に読み込んで表示させているところです。FileメニューのLoad New Multi Fileを選択すると現れるパネルにファイルをドラッグ&ドロップして、Load Allをクリックして下さい。



マルチディスプレイに表示される分子を見る方向は、メイン画面にシンクロして変化します。また、マルチディスプレイは、拡大可能で大きさや表示位置はCloseボタンをクリックして終了すると自動的に MultiDisp. ini に保存されます。

マルチディスプレイでの表示に不具合がある場合は、グラフィックハードウェアのアクセラレータのレベルを下げてみて下さい。

(2) GAMESS Input Options 設定パネルの若干の改良

- (a) IFREEZ の設定フィールドをクリアするボタンを付けました。
- (b) PCM 計算の溶媒の設定が簡単にできるようにしました。
- (c) 入出力ファイルの Base File 名は、これまで Preview/Edit Input 画面で変更していましたが、Input Options 設定パネルでもできるようにしました。

(3) スクリーンショットを保存するときの画像フォーマットに関して、これまでの JPEG を廃止し、PNG と Bitmat にしました。どちらをデフォルトにするかは、Facio. ini のパラメータ asPNG で設定します。asPNG=1 のとき PNG asPNG=0 のとき Bitmap

(4) ズームイン・ズームアウトの初期値は、Facio. ini の EyeZdiff で設定します。EyeZdiff=0 がデフォルト値で、これは最大限ズームインした状態です。

【Ver. 10.9.6】 May 12, 2007

- (1) 水素結合の自動検出と表示および、水素結合情報のテキストファイルへの出力を実装しました。水素結合の判定基準は下記の(a)と(b)で、パラメータは、PreferencesメニューのBond Propertiesで変更することができます。

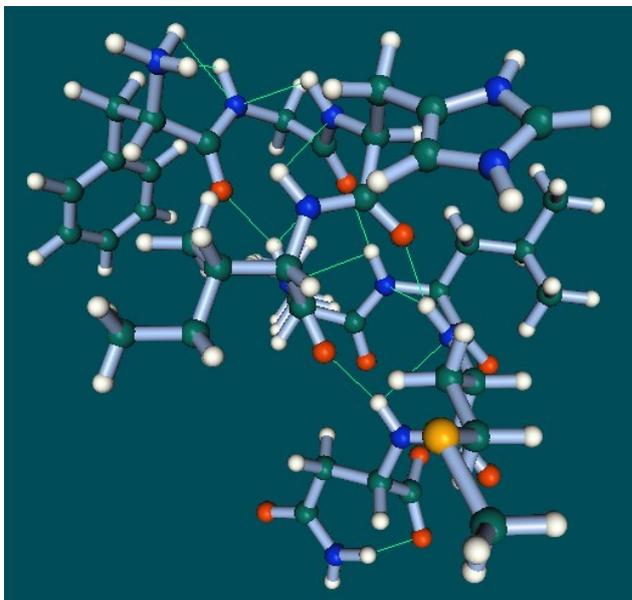
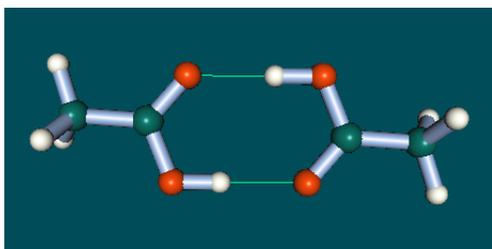
X --- H A (原子 X = N, O, F, Cl, Br, I 原子 A = N, O, F, Cl, Br, I, S)

- (a) HX_Max < 結合距離 (X A) <= H_BondCriterion
(b) H_BondAngleCriterion < 結合角 (X --- H A) <= 180

各パラメータのデフォルト値

HX_Max = 1.3 Å H_BondCriterion = 2.5 Å H_BondAngleCriterion = 90°

水素結合の検出は、構造データファイルや GAMESS などの出力を読み込んだ際に自動的に行われ、MiscellaneousメニューのShow Hydrogen Bondsにチェックマークを入れると下図のように、水素結合が線で表示されます。



UtilitiesメニューのDump Hydrogen Bondsで、水素結合に関与している原子の種類と通し番号、水素結合距離および角度のリストが出力されます。

- (2) Van der Waals 体積の計算

Van der Waals 半径は Bondi による値を用い、下記の式を用いて計算しました。

$$V_{vdw} = \sum_{AllAtoms} V_A$$
$$V_A = \frac{4\pi}{3} R^3 - \sum_{i=BondedAtom} \frac{1}{3} \pi h_i^2 (3R - h_i) \quad \text{where} \quad h_i = R - \frac{R^2 + d_i^2 - R_i^2}{2d_i}$$

- (3) WebLab ViewerLite の XYZ 形式ファイルの読み込みをサポート

【Ver. 10.9.5】 April 27, 2007

- (1) シミュレーションした IR、ラマン、VCD スペクトルのデータをテキストファイルで保存する際、分解能を COARSE (5cm⁻¹), MEDIUM (1cm⁻¹), FINE (0.1cm⁻¹) から選択できるようにしました。COARSE は、Facio のスペクトル画面の分解能です。
- (2) TINKER/MM3 によるエステルやカルボン酸の計算を兎に角可能にするためのパラメータを作成しました。最適化したパラメータではありませんが、中員環のラクトンやポリカーボネートなどのモデリングに有用です。
Additional_MM3PRM.txt の内容を TINKER の params フォルダにある mm3.prm に貼り付けて下さい。
- (3) MOPAC2007 の FORCE 計算の出力フォーマットが、これまで対応していた MOPAC2000, MOPAC93, MOPAC6, WinMOPAC3.0, 3.5, 3.9 と異なっているため読み込みエラーが起ることがわかりましたので、これを修正しました。
MOPAC では、バージョン毎に出力フォーマットの変更が行なわれています。
- (4) MOPAC2007 の分子軌道の可視化を行なうようにしました。可視化は、自前で行なっているため、グラフィックスファイルを出力するための GRAPH キーワードは、不要です。

構造最適化終了後に、分子軌道の係数も自動的に読み込むため、計算終了後、わずか 2 クリックするだけで HOMO が表示されます。UHF 計算では、 α および β 軌道を読み込みます。

FORCE 計算と同様に分子軌道の出力フォーマットもバージョン毎に異なりますが、対応はしません。従って MOPAC2007 以外のバージョンの MO の読み込みは、行ないません。ただし最適化構造の読み込みは、いろいろなバージョンのものが可能です。

【Ver. 10.9.4】 April 12, 2007

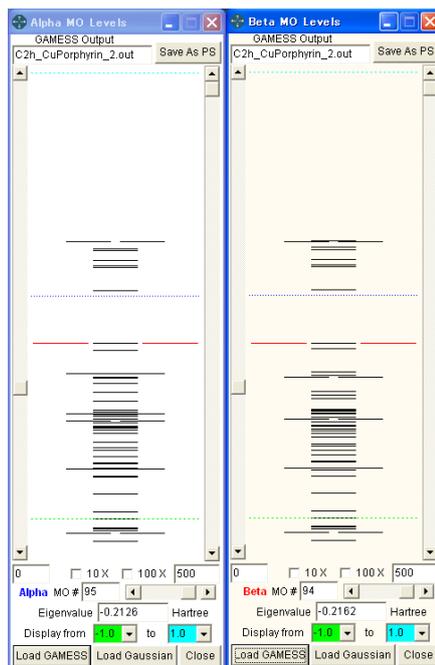
- (1) MSMS の計算で得られる溶媒排除体積と面積を表示するようにしました。
- (2) PC GAMESS で EM64T を使用する場合は、Facio.ini で EM64T=1 にして下さい。

【Ver. 10.9.3】 April 7, 2007

- (1) PC GAMESS の MRMP2 計算に関するいくつかの有用なオプションが入力ファイルに設定されるようにしました。
- (2) PC GAMESS において、EM64T に対応した CPU のパワーを発揮させるためのオプションが入力ファイルに設定されるようにしました。
- (3) MO のエネルギー準位の模式図で、開殻構造における ROHF 計算の α 軌道の最高被占軌道の準位の表示が一つだけエネルギーの低い軌道になっていましたので、これを修正しました。

【Ver. 10.9.2】 April 1, 2007

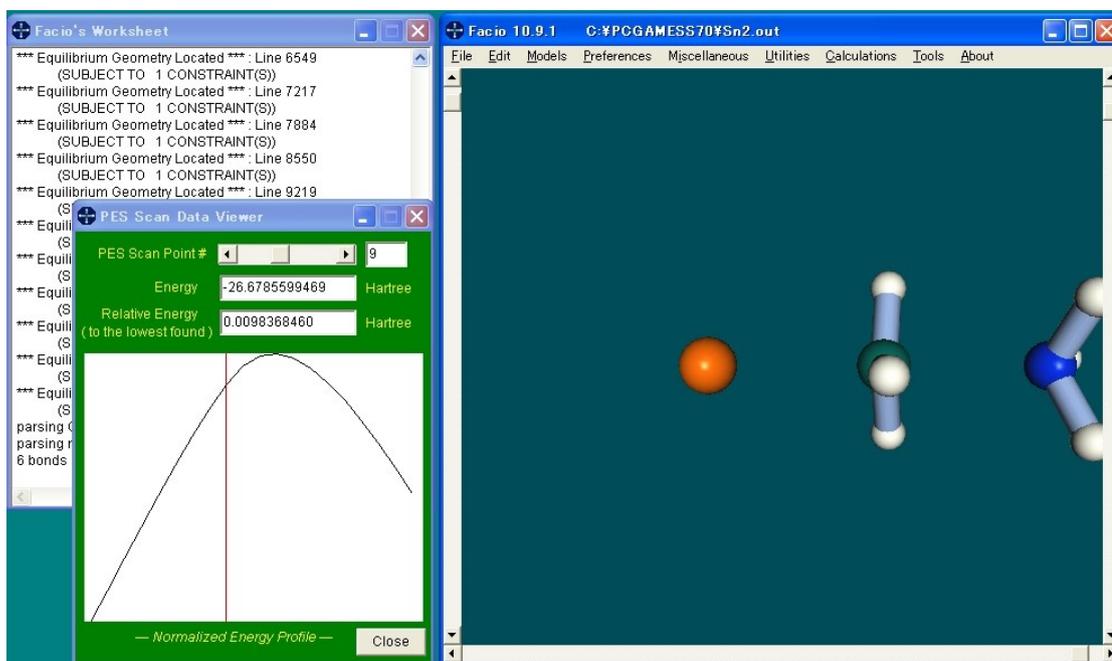
- (1) MO のエネルギー準位の模式図表示で、UHF 計算の α 軌道と β 軌道の準位をそれぞれ別々のウィンドウに表示する機能を付けました。
- (2) WinGamess は、VERSION = 7 SEP 2006 (R4) より TDDFT 計算ができるようになりましたので、それに対応した GUI を作りました。
- (3) オリジナルのフォルダアイコンを同梱。



【Ver. 10.9.1】 March 14, 2007

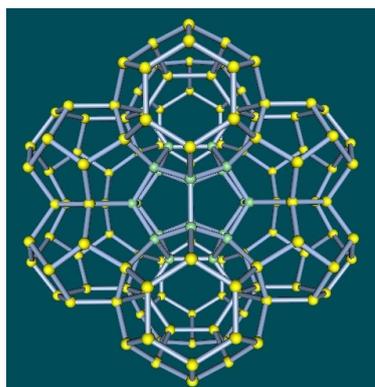
- (1) PC GAMESS を使ったポテンシャルエネルギー面の走査 (PES Scan) のための GUI を実装しました。2変数の計算に対応しています。Relaxed PES Scanに必要な IFREEZ の設定などは、自動的に行なわれます。フォルダ PES_Scan に入力ファイルと出力ファイルのサンプルを同梱しました。対称性の制限を入れた計算の例もあります。

計算結果の読み込みは、File メニューの Extract Optimized Geometries from PC GAMESS Relaxed PES Scan で行い、エネルギープロファイルおよび各点に相当する構造の表示は、Tools メニューの PES Scan Data Viewer で行います。

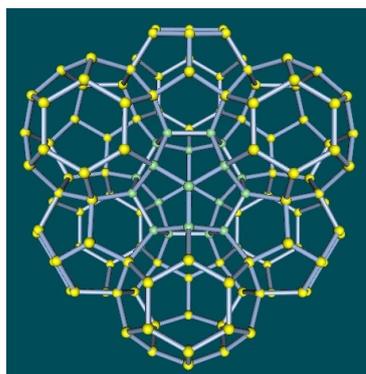


WinGamess では、結合角や二面角を変数とする PES Scan がそもそもできないので、対応はしていません。

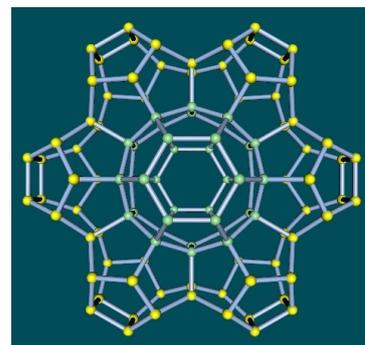
- (2) ガスハイドレート (気体包接化合物) の骨格のモデルを同梱しました。全て Facio を使ってゼロから作ったものです。モデリングの途中に作った仮想的な多面体炭化水素のモデルもあります。



Type I



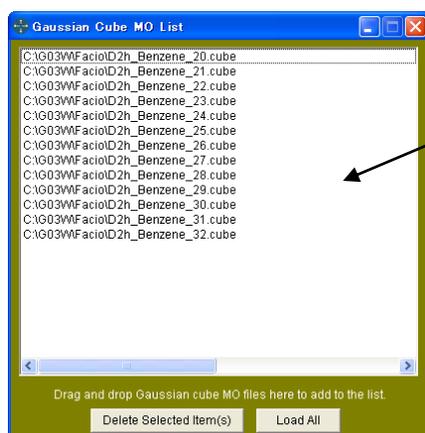
Type II



Type H

【Ver. 10.8.1】 February 4, 2007

- (1) 複数の Gaussian の Cube MO ファイルをドラッグ&ドロップして、一旦リストに登録した後、一度に読み込む機能を付けました。Tools メニューの Load Gaussian Cubes for MOs (in Multi File Drag and Drop Mode) を選択して現れるウィンドウに Cube MO ファイルをドラッグ&ドロップして下さい。比較したい MO だけを選んで表示するのに便利です。一つの Cube MO に複数の MO が含まれていても構いません。MO の数の上限は、20 個ですが、複数の Facio を起動すれば、リソースの続く限り無制限に表示が可能です。

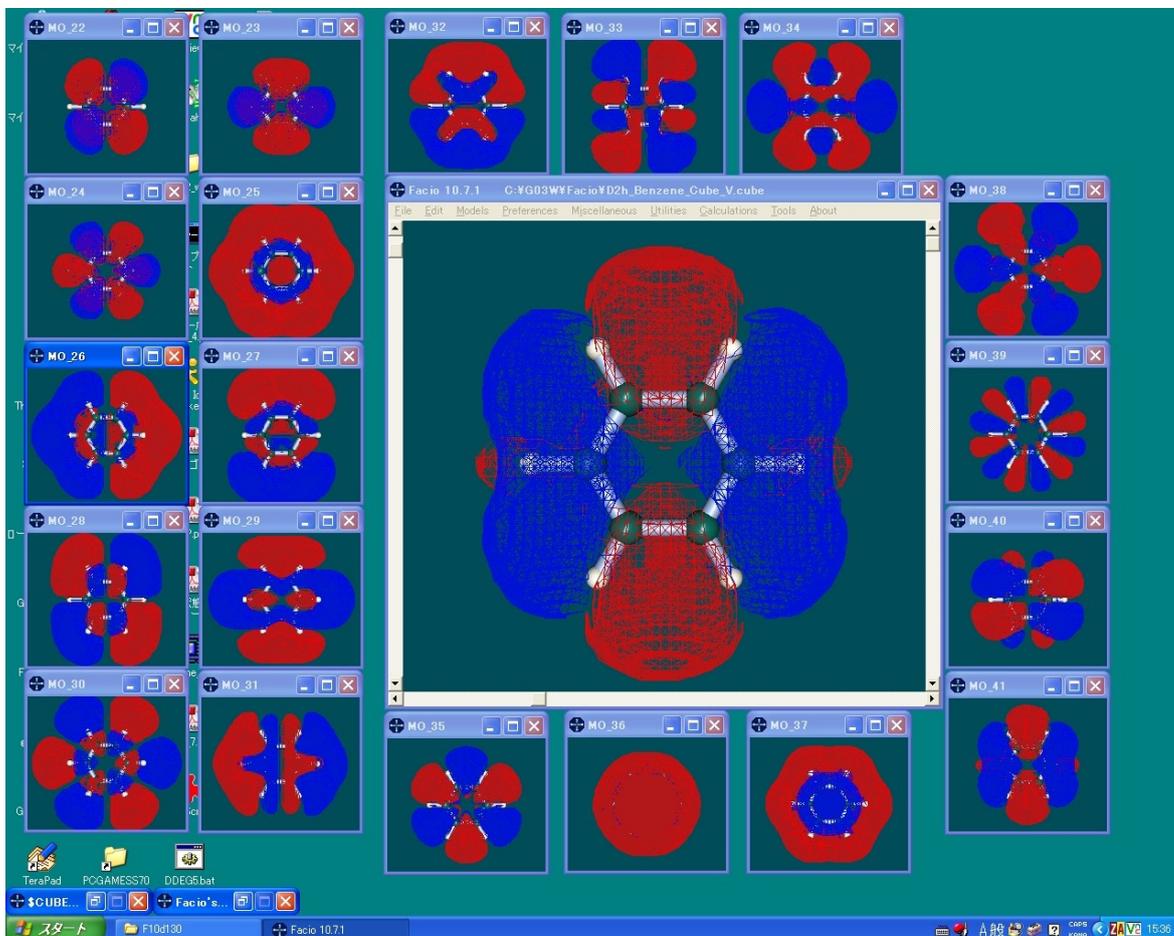


このウィンドウに Gaussian の Cube MO ファイルをドラッグ&ドロップする。

- (2) 指定した範囲の MO を連続的にそれぞれ別の Gaussian の Cube MO にして保存する機能を付けました。それぞれの Cube ファイルの名前には、MO の番号が自動的に付与されます。Tools メニューの Gaussian Utilities を見てください。
- (3) Gaussian の Formatted Checkpoint ファイルからの分子構造データの読み込み

【Ver. 10.7.1】 January 17, 2007

- (1) PC GAMESS および Gaussian の Cube ファイルにある複数の MO を 20 個まで同時にみる機能を実装しました。各画面での分子の配向は、メイン画面での動きにシンクロします。各画面の大きさや場所などは自由に変更することができ、その情報は MultiMO.ini に自動的に保存されます。各 MO の画像をビットマップファイルとして連続的に保存する機能もあります。



- (2) 分子を見る方向を数値で調節する機能を付けました。Utilities メニューの View Point Controller です。見る方向をロックする機能もあります。
- (3) これまで二重起動をしないようにしていましたが、それを廃止しました。複数の分子モデルを同時に見る場合に対応するためです。

【Ver. 10.6.2】 December 10, 2006

- (1) PC GAMESS の入力ファイルをドラッグ&ドロップすることにより計算を開始することのできるバッチファイル DDEG4.bat を作りました。
- (2) GAMESS の入力オプションで、GROUP=C1 以外の際に \$MCQDPT の NMOFZC の値が、正しくない場合があることがわかりましたので、これを修正しました。
- (3) GAMESS の入力オプションで、GROUP=C1 以外で LOCAL=BOYS または POP の場合に、SYMLOC=.TRUE. と MVOQ=6 が自動的に設定されるようにしました。

【Ver. 10.6.1】 November 23, 2006

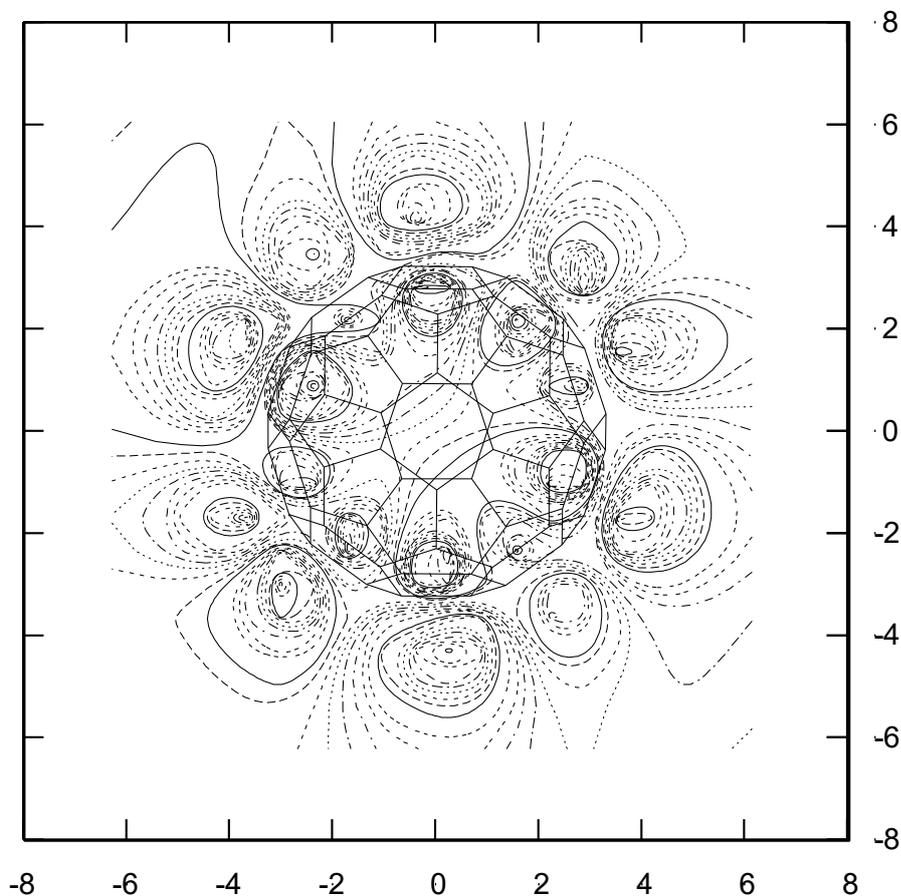
- (1) 原子番号の付け替えユーティリティ
Utilities メニューの Reassign Atom Numbers で起動します。
Start From パラメータで付け始めの番号 (デフォルト=1) を指定し、変更する必要がある原子のみをクリックし、Reassign Atom # ボタンを押すとクリックした順番で番号の付け替えが行われます。クリックしなかった原子の番号は、付け替える必要があれば自動的に変更されます。
- (2) GAMESS/MRMP2 計算用入力ファイルの作成をサポートする機能を付けました。
CI および MCSCF の計算スピードを上げるための PC GAMESS のオプションも自動的に入れます。このオプションの効果は抜群で、これ無しでは計算できない程です。
- (3) 基準振動や双極子モーメントを表すベクトル (矢) の属性を変更する機能
- (4) MO エネルギー準位の模式図をポストスクリプトファイルとして保存する機能
- (5) MOPAC 起動用の GUI

【Ver. 10.5.1】 October 8, 2006

- (1) OpenGL による描画ルーチンを改善し、CPU の使用率を大幅に下げました。
- (2) ドラッグ&ドロップによるファイルの読み込みをサポートしました。可能なファイル形式は、PDB, CC1, CC2, Free-formatted XYZ, MDL Mol, Tripos Mol2, Gaussian および GAMESS の output ファイルです。
- (3) MDL Mol ファイル、Tripos Mol2 ファイルの読み込みをサポートしました。
- (4) MOPAC93 と MOPAC2000 の基準振動計算の読み込みをサポートしました。
MOPAC6, WinMOPAC3.0, 3.5, 3.9 については、既に Ver. 9.8.3 でサポート済みです。
- (5) GAMESS と Gaussian で求めた双極子モーメントを矢で表示

【Ver. 10.4.1】 August 21, 2006

- (1) GNUPLOT と連携してMOの任意の断面を等高線で表示する機能を実装しました。下に示す図は、 C_{60} の LUMO の断面の様子です。その他のサンプルが `CubeMO_CrossSection` に同梱されています。Linux の場合、GNUPLOT の実行ファイルがあるディレクトリに書き込み許可を与えて下さい。



断面図に分子のワイヤーモデルを重ね書きするには Illustrator 等による編集が必要です。

- (2) Gaussian の Multi-Step Job の入力ファイルのサポート
- (3) Gaussian のユーザー設定のカスタムルートが一覧できるようにしました。設定できる個数も 30 に増やしました。
- (4) 下記の MCSCF 計算用のパラメータの自動設定に関するバグを修正しました。対称性の条件を課した場合の \$GUGA の NMCC および \$DET の NELS の自動設定
- (5) Linux ユーザーが解凍し易いように、Facio の配布アーカイブの圧縮形式を ZIP に変更しました。

【Ver. 10.3.1】 May 27, 2006

- (1) 分子軌道のエネルギー準位の模式的表示機能を GAMESS にも対応させました。
- (2) 原子の通し番号を原子の近傍にラベルとして表示する機能を付けました。

Miscellaneous メニューの Show Numeric Labels をクリックして下さい。

- (3) PC GAMESS 7.0 の新しい機能である TDDFT 計算用の入力ファイルを作成する機能を付けました。
- (4) 入力ファイルのプレビュー機能 (編集可) を付けました。また、GAMESS の計算におけるベースファイル名も同プレビュー画面で変更できるようにしました。
- (5) 下図のような元素の周期表を付けました。Miscellaneous メニューの Show Periodic Table をクリックして下さい。

Periodic Table

Group numbering is based on the new IUPAC system.
Atomic weights are based on $^{12}\text{C} = 12$ and conform to the 1993 IUPAC reported values. Number in () indicates the isotopic mass of longest half-life.

Lanthanides: La, Ce, Pr, Nd, Pm, Sm, Eu, Gd, Tb, Dy, Ho, Er, Tm, Yb, Lu
Actinides: Ac, Th, Pa, U, Np, Pu, Am, Cm, Bk, Cf, Es, Fm, Md, No, Lr

Illustrated by Masahiko Suenaga
<http://www.1sting.jp/en/06/>

- (6) X原子 (H, C, N, O, F, Si, P, S, Cl, Br, I 以外の原子) でも原子の種類に応じて玉の色を変化させる仕様に変更しました。
- (7) XYZ軸に-20 から 20Å の間に 0.5Å 間隔の目盛りを付けました。またXY平面上のX=YとX=-Yの場所にも目印を付けました。これらのしるしは、モデリングの際のガイドとして使うことができます。Miscellaneous メニューの Show Guides をクリックして下さい。
- (8) Facio により新たに作成した有機金属錯体のモデルをサンプルとして追加しました。

【Ver. 10.2.1】 Apr. 16, 2006

- (1) 分子の慣性モーメントを求め、慣性テンソルの主軸変換を行う機能を付けました。
- (2) 構造が少し違う2つの同じ分子を比較して、結合長、結合角、二面角の違いをリストにして出力する機能を付けました。
- (3) 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、エネルギー準位が混み合っている場合でも見やすくなりました。
- (4) 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を付けました。
- (5) Gamess による構造最適化で、計算は終了したが収束しなかった場合や計算が途中である場合の出力ファイルからも構造を読み取ることができるようになりました。

【Ver. 10.1.1】 Mar. 5, 2006

- (1) WINE および Mesa により、Linux の環境でも動作できるようになりました。
テストした Linux は、Fedora Core 4 と Scientific Linux 4.2 です。
WINE: <http://www.winehq.com/> Mesa: <http://www.mesa3d.org/>
- (2) Linux で動く UTChem 用の GUI を作成しました。Facio から UTChem のジョブの起動が出来ます。UTChem は、東京大学の平尾研究室により開発されている分子理論計算プログラムパッケージです。 <http://utchem.qcl.t.u-tokyo.ac.jp/>
- (3) Linux 上の PC GAMESS (Ver. 7.0)、MSMS および Tinker も、Windows の環境と同じ感覚で使用できます。
- (4) 基準振動アニメーションのフレームを連続して JPEG ファイルに保存する機能

【Ver. 9.9.1】 Dec. 25, 2005

- (1) 正二十面体対称性をもつフラレン (C80, C180, C240, C320, C500, C540, C720, C960, C980, C1280) の分子モデルを Facio でゼロから作りました。
- (2) WinGamess 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を付けました。

【Ver. 9.8.9】 Nov. 29, 2005

- (1) Gaussian の基準振動計算を読み込む際、読み込めない場合がまだあることがわかりましたので、このバグを修正しました。

【Ver. 9.8.8】 Nov. 28, 2005

- (1) IR, Raman, VCD スペクトルのデータをテキストとして保存する場合の分解能をこれまでの 5 (1/cm) から 0.1 に変更しました。
- (2) Gaussian の基準振動計算を読み込む際、振動ベクトルが読み込めない場合があることがわかりましたので、このバグを修正しました。

【Ver. 9.8.7】 Nov. 12, 2005

- (1) Gaussian の IRC 計算の表示法を変更しました。
Gaussian の formatted check file にある IRC 計算結果は、例えば、IRC に沿って 1 3 点の構造を計算し、7 番目の構造が遷移状態であるとする、7-6-5-4-3-2-1-8-9-10-11-12-13 の順序で格納されています。従ってこの順序で構造を連続的に表示すると、IRC に沿った滑らかな変化にはなりません。今回の変更では、滑らかな変化になるように表示の順番を 1-2-3-4-5-6-7-8-9-10-11-12-13 変えました。 エネルギーの変化もグラフで表示されます。

- (2) IRC 計算の一連の構造を表示しているとき、Utilities メニューの原子間距離、結合角、二面角の表示が、IRC の最初の構造に基づいたものを計算して表示していたため、構造の変化に対応していませんでしたので、修正しました。
- (3) Gaussian の ADMP、BOMD による MD 計算の Trajectory を可視化します。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グラフで表示します。Trajectory の時間軸に沿った構造変化のアニメーション表示もでき、エネルギーのグラフにも対応した位置が示されます。
- (4) Cartesian Coordinate File 1、2 (cc1, cc2) およびフリーフォーマットの XYZ ファイルの読み込みをサポートしました。ここで言うフリーフォーマット XYZ 形式とは、各行が元素記号と X、Y、Z 座標からなるシンプルな構造データファイルです。データ間は、スペースが一つ以上ある以外は特にフォーマットは規定していません。Facio の XYZ フォルダ内に例があります。

【Ver. 9.8.6】 Oct. 2, 2005

- (1) IR, Raman, VCD スペクトルの波数と強度をテキストファイルで保存する機能を付けました。
- (2) 原子の番号を指定するとその原子が他と区別されて表示される機能を付けました。Miscellaneous メニューの「Highlight Specified Atom」

【Ver. 9.8.5】 Sept. 24, 2005

- (1) Gaussian CUBE MO データの読み込みの際、データが正常であるにもかかわらず「CUBE data may be truncated」と判断する場合がありますので、これを修正しました。

【Ver. 9.8.4】 Sept. 17, 2005

- (1) Gaussian の ONIOM レイヤーを設定するための GUI を作成しました。
- (2) VCD (振動円二色性) スペクトルのシミュレーション。サンプルデータとして I -メントールと d -メントールの VCD 計算結果を同梱しました。
- (3) 基準振動の変位ベクトルを矢で表示する機能を付けました。
- (4) g03.exe ではなく g03w.exe を使って Gaussian を起動するようにしました。

【Ver. 9.8.3】 Aug. 27, 2005

- (1) 欠落している水素原子を補完する機能を付けました。
- (2) MOPAC6, WinMOPAC3.0, 3.5, 3.9 で計算した基準振動の読み込みとそのアニメーション表示を可能にしました。

- (3) スクリーンショットをとり JPEG 画像ファイルとして保存する機能を付けました。Windows の標準機能である Alt + PrintScreen による取り込みとは異なり、ウィンドウの枠やメニューバーなどは除外されます。

【Ver. 9.8.2】 Jul. 9, 2005

- (1) Gaussian の Opt=QST2, QST3 計算に必要な反応物、生成物、および遷移状態の推定構造を設定する機能を付けました。
- (2) MODEL レコードのある PDB ファイルで、かつ CONECT レコードがある場合の読み込みエラーを修正しました。

【Ver. 9.8.1】 Jun. 17, 2005

- (1) SSH / SFTP クライアント機能を実装しました。これによりリモートサーバー上にある Gaussian に対して SSH / SFTP 接続を通してジョブの依頼をしたり、計算結果を受け取ったりすることができるようになりました。

【Ver. 9.7.6】 Apr. 18, 2005

- (1) Facio と外部プログラムを異なるドライブにインストールしても良いようにしました。
- (2) ユーザーが変更した Main ウィンドウの位置とサイズおよび Worksheet の位置を Facio.ini に保存できるようにしました。Preferences メニューの「Save Position and Size」を使って下さい。
- (3) 分子モデリングを行うとき良く使用する Edit メニューを Edit Tool Box としてメニューから独立させました。Miscellaneous メニューの「Show Edit Tool Box」を選択すると、Edit Tool Box が現われます。

【Ver. 9.7.5】 Apr. 9, 2005

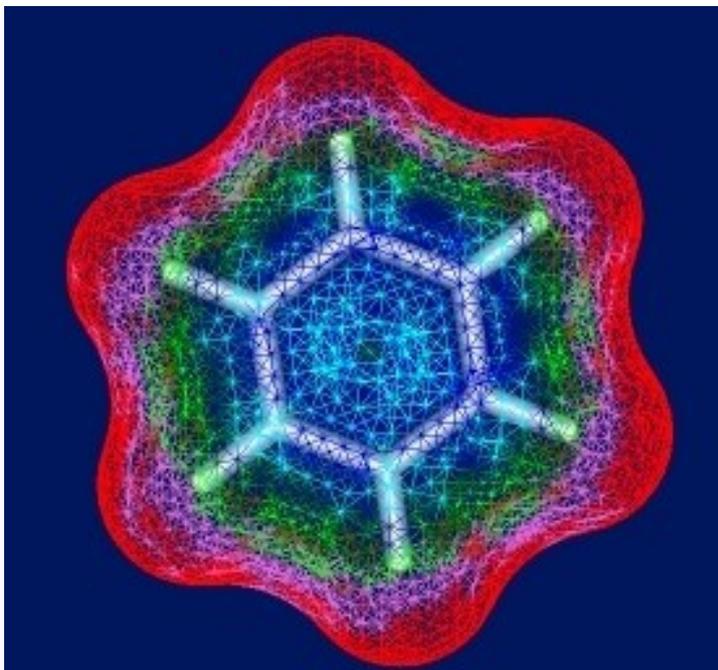
- (1) メッシュ表示をさせる CUBE データの格子点の間隔の上限が、調整できるようになりました。デフォルトは 0.4 Å ですが、メッシュ表示がされない場合には値を大きくしてみてください。

【Ver. 9.7.4】 Mar. 12, 2005

- (1) Gaussian の IRC 計算結果を可視化できるようになりました。IRC の各点における構造データの入った Formatted Check File (*.fch) を読み込み、各点の構造を連続で表示します。コントロールパネルは、GAMESS のものと共通です。

【Ver. 9.7.3】 Feb. 26, 2005

- (1) MSMS で求めた溶媒排除表面上に、PC GAMESS もしくは Gaussian 03W で計算した静電ポテンシャルの値をマッピングすることができるようになりました。



- (2) Ver. 9.6.1 で WinGamess に対応した際、PC GAMESS で静電ポテンシャルや電子密度の CUBE データを出力させるための入力オプションが設定されなくなっていたので、これを修正しました。
これに関して不具合があるのは、Ver. 9.6.1 と 9.7.2 で、それ以前のバージョンでは問題ありません。
- (3) ある範囲 (Facio.ini の ApproxityCriteria で設定) 以内の原子を正確に Z 軸に移動させる機能を追加しました。対称性を有する分子のモデリングに便利です。

【Ver. 9.7.2】 Feb. 5, 2005

- (1) Gaussian 03W の分子軌道 CUBE データの可視化、基準振動のアニメーション表示、軌道準位やその縮重状態を模式図で表示するためのツールを実装しました。
また、Gaussian 03W の Utilities (CubeGen, FormChk, FreqCheck) のための GUI も作りました。
- (2) Molekel の起動をサポートしました。
- (3) PC Gamess および WinGAMESS の実行ファイルを空白のあるフォルダーの下に置いた場合 (例えば、C:\Program Files\Gamess\Gamess.exe)、計算結果を入れるための Facio というフォルダがうまくできないことがわかりましたのでこれを修正しました。

【Ver. 9.7.1】 Jan. 22, 2005

- (1) MCSCF 計算の入力オプションを設定するための GUI を装備しました。
電荷とスピン多重度の値から総電子数を計算し、
\$DRT, \$DET のパラメータが自動的に設定されるようにしました。
- (2) Gaussian 03W の入力ファイル作成および起動用の GUI を実装しました。

Facio から Gaussian を走らせるためには、環境変数 GAUSS_EXEDIR を必ず設定するようにして下さい。Gaussian を default でインストールした場合、GAUSS_EXEDIR の値は、c:\%G03W になります。
環境変数の設定は、Windows 98, ME では、autoexec.bat に
set GAUSS_EXEDIR=c:\%G03W と記述し、OS を再起動することにより行われます。
Windows XP ではマイコンピュータのプロパティ (システムプロパティ) の中の、
詳細設定パネルの環境変数で行います。
OS の再起動は、した方が無難です。OS の微妙な差異により、
しなくても設定が反映される場合もありますが、
そうでない場合もあるからです。(最後の3行は、1月23日に改訂)

ユーザーがよく使用するルートセクションのコマンドを Facio.ini に
CustomRoute1, CustomRoute2, ... として9個まで登録できるようにしました。
Facio.ini にあるこれらの文字列を書き換えることにより、各ユーザーが
使い易いようなルートコマンドのセットを作ることができます。

*** Gaussian の計算結果の可視化は、次のバージョンで実装の予定です。***

- (3) NOSYM=0 でかつ GROUP=C1 以外での計算結果において、軌道エネルギーが
読み込まれない場合があることがわかりましたので、修正しました。
- (4) 軌道の対称性を MO Viewer パネルに表示するようにしました。
- (5) GROUP=C1 以外の場合、HOMO, LUMO の軌道番号が正しくなかったのを
修正しました。GROUP=C1 以外の場合、与えられた座標は、対称的に独立な
部分構造です。まず対称性をもとに分子全体の構造を求め
それから HOMO, LUMO の軌道番号を決定するようにしました。
- (6) 対称性を有する分子のモデリングのためのちょっとした機能を追加しました。
ある範囲 (Facio.ini の ApproxityCriteria で設定) 以内の原子を正確に
XY 平面あるいは XZ 平面に移動させる機能です。
- (7) Winmostar の起動ができるようにしました。 <http://winmostar.com/>
- (8) 対称性を有する分子の PDB ファイルをサンプルとして追加しました。
PDB フォルダの SymmetryUnique フォルダにあります。
対称性を考慮したモデルを作る場合の参考となるでしょう。
- (9) Windows 98SE と XP で、Ini ファイルへの保存の挙動が異なるため、
設定の変更が Facio.ini に正しく保存されない場合があることが
わかりましたので、これを修正しました。

【Ver. 9.6.2】 Nov. 14, 2004

- (1) GAMESS の入力オプションにおいて、
\$CONTRL NOSYM=0 RUNTYP=OPTIMIZE でかつ \$DATA GROUP=C1 以外の場合、
output ファイルに COORDINATES OF SYMMETRY UNIQUE ATOMS が出力
されますが、そのフォーマットが PC GAMESS と WinGamess で少し違うため
WinGamess の output ファイルが読めないという不具合が見つかりましたので
修正しました。
- (2) SYMMETRY UNIQUE ATOMS データがある場合、SYMMETRY UNIQUE ATOMS のみを
モデルに表示させるか否かを定めるためのチェックボックスを
メニュー-Preferences>>External Programs に設けました。

このオプションは、Load New Gamess Output で読み込む場合にのみ有効です。

【Ver. 9.6.1】 Nov. 7, 2004

- (1) WinGamess に対応しました。

WinGamess とは、Nuno A. G. Bandeira 氏により Cygwin の環境で
コンパイルされた GAMESS (VERSION = 19 MAY 2004 (R4)) の
PC WIN32/GCC バージョンです。

<http://www.msg.ameslab.gov/GAMESS/dist.pc.html>

Facio を使うと、WinGamess で実装されていない CUBE データの可視化等を
除いて、PC GAMESS とほとんど同じ感覚で使うことができますが、
punch ファイルの拡張子が dat である点が少し違います。
これは、Facio が WinGamess のパッケージに同梱されている runscript.csh を
使って WinGamess を起動しているためです。変更することは可能でしたが
runscript.csh での設定を尊重して、何も変更していません。
punch ファイルのほか、中間ファイルのファイル名や生成場所等が
PC GAMESS とは若干異なっていますが、入力ファイルや最終的な結果は
すべて Facio というフォルダに集めて保存されます。

「Facio における PC GAMESS と WinGamess の違い」については、
マニュアルを参照して下さい。

- (2) Punch ファイルから CUBE MO データを読み込む際、同時に output ファイルから
軌道エネルギーの値を読み込んでいますが、ある特殊な場合において
読み込む軌道エネルギーの数に不具合があることがわかりましたので
これを修正しました。

— 不具合の起こる例 — アンモニア・ラジカルカチオンの 6-31G(d)/UHF 計算

もともと GAMESS の output ファイルでは、エネルギーの高い空軌道は
出力されませんがどの空軌道以降が省略されるかどうかの基準が
よくわかりません。これまでは、自分なりに「あるルール」を見出し、

軌道エネルギーの読み込む数を決定していたのですが、上記の UHF 計算では合わないことが分かりました。

そういう訳で、軌道エネルギーを数えるアルゴリズムを変更しました。

【Ver. 9.5.1】 Oct. 24, 2004

- (1) TINKER のパラメータファイルの絶対パス名が「空白を含む」場合
(例えば、C:\My Document\Tinker\params\amber.prm)、
TINKER の Key ファイルの parameters の値をパラメータファイルの
絶対パス名が実行ファイルからの相対パス名になるように変更しました。

これは、絶対パス名中に「空白を含む」場合の
不具合に対処するための変更です。

ただし、このとき TINKER の実行ファイルとパラメータファイルの
インストール場所は、次の二つの場合のみを想定しています。

```
Tinker ----- bin ----- optimize.exe
      |
      --- params --- mm3.prm
                |
                --- amber.prm
```

(実行ファイルのあるフォルダ名は、bin 以外でも可)

または

```
Tinker ----- optimize.exe
      |
      --- params --- mm3.prm
                |
                --- amber.prm
```

いずれの場合も、
パラメータファイルを入れるフォルダの名前は、params に限ります。

絶対パス名中に「空白がない」場合は、絶対パス名でパラメータファイルが
記述されますので、パラメータファイルを入れるフォルダの名前は、
params でなくても構いません。

- (2) UHF 計算で得られる α 軌道と β 軌道のうち、これまで α 軌道のみを
取り扱ってきましたが、 β 軌道も表示できるようになりました。
また、ICORBS の指定も、UHF 計算の場合は自動的に相当する β 軌道の
CUBE データを求めることができるようにしました。

例えば、H2O ラジカルカチオンの HOMO と LUMO はそれぞれ #5, #6 ですが、
UHF 計算の場合に、ICORBS 入力オプションを HOMO-2, LUMO+1 に設定すると、
入力ファイルの \$ELDENS は、次のようになります。

```
$ELDENS IEDEN=1 ICORBS(1)=3, 4, 5, 6, 7,  
-3, -4, -5, -6, -7 $END
```

即ち、相当する β 軌道 (-3, -4, -5, -6, -7) の CUBE もいっしょに計算する設定になります。

これらの修正は、Bern 大学の Ernst Schumacher 名誉教授のご指摘によるもので、ここに感謝の意を表します。Schumacher 名誉教授は、GAMESS を実行するための GUI である RUNpcg および Cygam の作者でもあられます。

<http://www.chemsoft.ch/qc/RUNpcg.htm>
<http://www.msg.ameslab.gov/GAMESS/dist.pc.html>

- (3) マウスホイールの回転により、分子モデルの拡大・縮小ができるようにしました。この機能は、あるユーザーの方のリクエストに応えたものです。

【Ver. 9.0.1】 Sept. 12, 2004

- (1) TINKER-MM3 の計算と連携した構造最適化ができるようになりました。

Facio が自動判別できる原子タイプは以下のものです。

1	C	sp3 Alkane
2	C	sp2 Alkene
3	C	sp2 Carbonyl
4	C	sp Alkyne
5	H	except on N, O, S
6	O	C-O-H, C-O-C, O-O
7	O	C=O Carbonyl
8	N	sp3
9	N	sp2 (Amide)
11	F	Fluoride
12	Cl	Chloride
13	Br	Bromide
14	I	Iodide
15	S	-S- Sulfide
16	S+	>S+ Sulfonium
17	S	>S=O Sulfoxide
18	S	>SO2 Sulfone
19	Si	Silane
21	H	-OH Alcohol
22	C	Cyclopropane
23	H	NH Amine/Imine
25	P	Phosphine
28	H	Amide
37	N	Pyridine
38	C	Cyclopropene

(but bond stretching parameter 38-38 is undefined in MM3)

39	N+	N sp3 Ammonium
40	N	N sp2 Pyrrole
41	O	O sp2 Furan
42	S	S sp2 Thiophene
44	H	SH Thiol
46	N	Nitro
47	O	Carboxylate
48	H	Ammonium
49	O	Epoxy
56	C	C sp3 Cyclobutane
57	C	C sp2 Cyclobutene
58	C	C=O Cyclobutanone
124	H	C-H Acetylene

【Ver. 8.7.1】 Jul. 30, 2004

- (1) 分子軌道、全電子密度、静電ポテンシャルをメッシュで表現することができるようになり、等値表面をよりはっきりと見ることができるようになりました。

【Ver. 8.5.1】 Jul. 5, 2004

- (1) GAMESS による Raman 強度の計算およびスペクトルのシミュレーションができるようになりました。
なお、この機能は Bern 大学の Ernst Schumacher 名誉教授から頂いたコメントにより実装したもので、改めてここに感謝の意を表します。
- (2) Facio のモデリング機能を示す例として、以下に示すような複雑な構造を持つ動物毒のモデルを PDB フォルダの Toxins に入れました。どのようにモデリングを行ったかがわかるように途中の構造もあります。

ブレベトキシシン-A
ハリコンドリン-B
マイトトキシシン
ネオスルガトキシシン
オカダ酸
ピンナトキシシン-A

【Ver. 8.3.1】 Jun. 22, 2004

- (1) TINKER (Ver. 3.9) の nucleic.exe を使って核酸のモデルが作れるようになりました。
詳しくは、Tools メニューの Polynucleotide Builder を参照して下さい。

***** 注意 *****

TINKER Ver. 4.1 および 4.2 (9月8日付けの修正版以前の 4.2) の nucleic.exe にはバグがあるため、
B型の二重らせんで塩基対が4以上ある場合、
またはZ型の場合に、塩基対の間にぶつかり合いが見られます。

上記のバグのうち、B型二重らせんに関するものは、
Ver. 4.2 (minor revision: Sept. 8, 2004)において修正されましたが、
Z型については、まだ修正されていません。

- (2) 外部プログラムがルートフォルダ (C:¥ や D:¥) にある場合、
計算がうまく行われなかったり、Windows98 の環境では実行ファイルの
場所そのものがわからなくなることがわかりましたので、
ルートフォルダにあるかどうかをチェックするようにしました。
PC GAMESS は、そもそもルートフォルダ内では実行できないようです。

【Ver. 8.0.2】 May 31, 2004

- (1) 日本語以外のシステムにおいて、IR スペクトルの波数目盛が
ずれて表示される現象がありましたのでこれを修正しました。
また、IR スペクトルの線幅の計算に誤りがありましたので、
修正しました。

これらの修正は、Bern 大学の Ernst Schumacher 名誉教授の
ご指摘によるもので、ここに感謝の意を表します。
Schumacher 名誉教授は、GAMESS を実行するための GUI である
RUNpcg の作者でもあられます。

<http://www.chemsoft.ch/qc/RUNpcg.htm>
<http://www.msg.ameslab.gov/GAMESS/dist.pc.html>

- (2) オリゴ糖のサンプルとして同梱している Raffinose.pdb の構造に
誤りがありましたので修正しました。

【Ver. 8.0.1】 Apr. 30, 2004

- (1) PC GAMESS ver. 6.4 により出力される分子軌道の
3D グリッドデータ (\$CUBE) を可視化することが
できるようになりました。
これにより、STO-3G, MINI 以外の Ab initio 用の基底関数で
計算した MO も表示が可能になりました。

\$CUBE/Molecular Orbital データを出力させるためには、
GAMESS 入力オプションで ICORBS にチェックし、どこから
どこまでの MO を計算するのかを HOMO と LUMO を基準にして

入力して下さい。デフォルトでは、HOMO-0 から LUMO+0 まで
即ち、HOMO と LUMO のみの \$CUBE データが Punch ファイルに
出力されます。

なお、半経験的分子軌道法の計算や RUNTYP=OPTIMIZE 以外の
計算では、\$CUBE/Molecular Orbital は出力されません。
また RUNTYP=OPTIMIZE の場合でも、既に最適化されている
構造を初期値として用いると出力されないようです。

- (2) 孤立原子を削除する際のバグを修正しました。
- (3) AddHydrogen で水素を続けて付ける場合、誤って必要以上に
水素原子を付加しても重ならないようにしました。

【Ver. 7.5.1】 Apr. 5, 2004

- (1) 糖鎖モデル作成のために、16 x 2 個のグリコシル基を
置換基として用意しました。
- (2) ついでに、水酸基、ホルミル基、アミノ基もつけました。
- (3) 対称性をいれて GAMESS の計算ができるようになった。
関連パラメータ： GROUP, NAXIS (GROUP=C1, CN のみ)
- (4) 特定の原子を固定して構造最適化できるようになった。
関連パラメータ： IFREEZ
- (5) METHOD=CONOPT を使った遷移状態探索ができるようになった。
関連パラメータ： IFOLOW
- (6) GAMESS 異常終了の原因を表示するようにした。
- (7) punch ファイルから \$VEC データを読み込み、入力ファイルに
貼りつける機能を付けた。
関連パラメータ： GUESS=MOREAD
- (8) 角度や距離の調整の際、変化量だけでなく実際の角度や
結合距離を表示するようにした。
- (9) Auto Centering の機能は、デフォルトで OFF にした。
タンパク質および核酸では、デフォルトで ON

【Ver. 7.0.1】 Mar. 11, 2004

- (1) TINKER の protein.exe を使ってポリペプチドのモデルが
作れるようになりました。
詳しくは、Tools メニューの Polypeptide Builder を参照して下さい。
- (2) PC GAMESS ver. 6.4 の新しい機能である「DFT 計算」が行えるように

GAMESS 入力オプションのパネルを変更しました。

- (3) 角度や距離の調整がより細かく行えるようになりました。
角度の最小単位は、0.1 度で、距離の最小単位は、0.001 オングストロームです。調整用のパネルにある Fine adjustment にチェックマークを入れると細かな変化になります。

【Ver. 6.5.1】 Feb. 9, 2004

- (1) 基準振動の計算で得られる赤外強度をもとにスペクトルをシミュレーションする機能を付けました。
使い方は、Tools メニューの Normal Mode Vib. Viewer を参照して下さい。
- (2) GAMESS による電子密度の計算 (CUBE データの作成) は、Ab initio 計算の場合にしか行われず、巨大な分子の電子密度を求めるのが困難でした。そこで、PM3 や AM1 のような半経験的分子軌道から全電子密度を求める機能を付けました。
使い方は、Tools メニューの Molecular Orbital Viewer を参照して下さい。
- (3) Delete Atom の機能を修正しました。

孤立原子や結合情報が全くない PDB ファイルに対して、Delete Atom を行うとハングアップすることがありましたが、これを修正しました。

【Ver. 6.0.1】 Jan. 24, 2004

- (1) \$HESS グループデータ (Hessian Matrix) を Punch ファイルから読みとり GAMESS 入力ファイルに挿入する機能を付けた。これは、遷移状態を求める場合に必要となる。
- (2) RUNTYP=HESSIAN の計算後、虚の振動数の有無をチェックする機能を付けた。
- (3) IRC 計算で得られる一連の構造を連続的に表示できるようになった。
- (4) Facio で使用できる GAMESS の新たな入力オプション

```
$CONTRL  RUNTYP=SADPOINT
          =IRC
$STATPT  HESS  METHOD
$BASIS   NDFUNC  NFFUNC  NPFUNC  DIFFSP  DIFFS
$IRC     PACE  SADDLE  FORWRD  NPOINT  STRIDE
```

- (5) GAMESS の計算で最適化構造が得られている場合には、GAMESS の入力ファイル INPUT での座標のフォーマットは、15.10F で書き出し、そうでない場合は、PDB ファイルでのフォーマット 8.3F で書き出します。

最適化構造が得られている場合は、GAMESS の入力オプションパネルにその旨が表示されます。

- (6) 正射影による表示ができるようにした。これは、二つの分子の位置関係を正確に調整する場合に必要となる。
例えば、二つのベンゼンの環平面を平行にしてある距離だけ離れたものを作る場合、遠近法射影ではどこが平行であるか判りにくい。
このようなとき、正射影を使うとよい。
Utilities メニューの "Adjust Position and Tilting Angle" も参照して下さい。

【Ver. 5.0.1】 Dec. 24, 2003

- (1) 等電子密度表面と等静電ポテンシャル表面の表示ができるようになった。

(2) 電子密度と静電ポテンシャルを計算するための GAMESS 入力オプションを設定できるようにした。

新しい入力オプションは、

MESH	データの粗密度を指定する。 値は、COARSE, MEDIUM, FINE の3つ
ELDENS	電子密度を計算する
ELPOT	静電ポテンシャルを計算する
MORB	MORB=0 の場合 (全電子密度を計算する) MORB=xxx の場合 (分子軌道 番号 xxx の電子密度を計算する。)

- (3) Windows XP で、Facio.ini が読み込まれないバグを修正した。

【Ver. 4.7.1】 Dec. 11, 2003

機能的には、Ver. 4.6.1 とほとんど変わりませんが

- (1) OpenGL による描画部分を大幅に改良した。
結果として、例えば、基準振動のアニメーション表示が格段に速くなった。
- (2) ドイツ語やフランス語の環境で Facio を使うとフリーズすることがあったが、この原因を突き止め解決した。
- (3) Facio の実行中に発生する例外 (アクセス違反など) を捕らえるようにした。この機能は、Facio.ini の以下の部分を編集することにより、OFF にすることもできる。

```
[AppControl]
ExceptionMessage=ON
```

ここで、

ON ==> 例外をトラップする
OFF ==> 例外を無視する
(重大な例外の場合は、フリーズすることがある)

【Ver. 4.6.1】 Nov. 7, 2003

- (1) コマンドラインから PDB ファイル名を引数にして起動できるようになった。

(使い方)

コマンドラインから、`Facio.exe xxx.pdb`
と入力してください。 `xxx.pdb` は、Facio で見ようとする分子の
PDB ファイルです。

- (2) タンパク質の PDB ファイルで水素原子との結合情報を生成するようにした。

- (3) 描画のインターバルをカスタマイズできるようにした。
Facio.ini 中の次の部分がインターバルを設定しています。

```
[Timer]  
Interval=50
```

上の設定値では、50 マイクロ秒ごとに描画を行います。
グラフィックカードのパワーがあまりない場合は、
大きな値 (例えば 100) に設定してみてください。
10 以下の値に設定しないでください。フリーズする可能性があります。

- (4) 孤立原子に水素を付けることができるようになった。

- (5) PDB ファイルの MODEL レコードを認識するようにした。
この場合、最初のモデルだけを表示し、残りのモデルは
表示しません。

【Ver. 4.5.1】 Oct. 17, 2003

- (1) 分子軌道の表示に関して

これまで、サポートしている基底関数のセットは、
STO-3G, PM3, AM1, MNDO の 4 種類でしたが、
今回のバージョンアップで MINI を取り扱うことができるように
なり、水素からラドンまでの元素を含む分子軌道の表示が
可能になりました。ランタニドでは 4f 原子軌道を見ることが
できます。

- (2) GAMESS の計算オプションのパネルで、IREST と GUESS を
設定できるようにしました。IREST=-1 にすると GAMESS の計算が
前回止まった場所からリスタートすることができます。この時、
GUESS は、自動的に MOSAVED になり DICTNRY から MO の初期値と
前回終了時の各原子の座標 (前回の計算が構造最適化ならば
最適化あるいは途中まで最適化されたもの) が読み込まれます。

- (3) タンパク質の PDB の読み込み時にエラーが起こるものがありましたが、
それらの原因を調べ修正しました。

【OSの違いによる不具合等】

Facioの動作確認は、主にWindows 7で行っていますが、Windows 10でも正常に動作しています。

不具合がある場合は、グラフィックスカードのアクセラレーションによるものと思われるので、アクセラレーションのレベルを一段階づつ下げてみて様子を見てください。

それでもだめな場合は、グラフィックスカードのドライバを最新のものにして下さい。それでもまだだめな場合は、DirectX も更新して下さい。