

FCC (Facio Cartesian Coordinate) Format for Computational Chemistry

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:¥G03W¥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 桁に対応しているので、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ので、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。