

***** Facio Ver.27.5.1 マニュアル *****

拙作Facioをダウンロードいただき、ありがとうございます。

【はじめに】

Facio (ファキオ) は PC GAMESS/WinGamess および Gaussian のためのフリーの計算化学統合環境で、実行に必要な分子モデリング、入力ファイルの作成、計算の開始、計算結果の可視化等を GUI によりサポートします。

バージョン10より、Linuxに対応しました。詳しくはLinux_Readmeを参照して下さい。
バージョン11ではFMO(フラグメントMO)の入力ファイル作成を支援するGUIが新たに完備されました。

バージョン13では、Gaussian 09の出力ファイルの読み込みに対応しました。

#####

Facioを論文等で引用される場合は、下記のようにお願い致します。

M. Suenaga, *J. Comput. Chem. Jpn.*, Vol. 4, No. 1 pp. 25-32 (2005)

M. Suenaga, *J. Comput. Chem. Jpn.*, Vol. 7, No. 1 pp. 33-53 (2008)

#####

論文のオンライン版は、下記のURLで公開されています。

<http://www.sccj.net/publications/JCCJ/v4n1/a11/abstj.html>

<http://www.sccj.net/publications/JCCJ/v7n1/H1920/abst.html>

【インストール】

Windowsのレジストリは一切変更しませんので、Facio自身に関しては特にインストールの作業は、ありません。

配布用のZIPアーカイブを解凍してできるFacio2751-64またはFacio2751-32という名前のフォルダを適当な場所に置き、中にあるFacio.exeをダブルクリックするとFacioが実行できます。

Facioを置く場所は、書き込みのできるドライブであれば、USBフラッシュメモリのような場所でも構いません。

Facioが使用する外部プログラム(PC GAMESS, Tinker, MSMS, WinGamess, Gaussian, MOPAC)は同梱できませんので別途ダウンロードしてインストールする必要があります。

(といっても、Gaussian以外は解凍して適当な場所に置くだけです)

なお、PC GAMESSは現在ではFireflyという名称になっています。

***** 注意 *****

ただし、PC GAMESSの実行ファイル(Gamess.exe)は、ルートフォルダ(C:¥¥やD:¥¥など)に直接置かないようにして下さい。これは、PC GAMESSが課している制限です。

(例)	C:¥¥Gamess.exe	不可
	C:¥¥Gamess¥¥Gamess.exe	可

もう一つの制限として、PC GAMESS は必ずローカルドライブに置かなければなりません。ネットワークドライブ上に置くと計算ができません。詳しくは後述の「外部プログラム」を参照してください。

Facio における PC GAMESS と WinGamess の違い

(a) WinGamess での punch ファイルの拡張子は、dat ですので、Facio でもそのようにしています。PC GAMESS の場合は、拡張子 pun を使っています。

(b) WinGamess では、CUBE ファイルの生成が実装されていないので、入力オプションパネルの \$CUBE の部分は使用できないようになっています。ELDENS (電子密度) と ELPOT (静電ポテンシャル) も同時に使用不可になっていますが、これは WinGamess でも ELDENS と ELPOT の計算ができますが、その出力は、PC GAMESS のものと大きく違い、指定した平面におけるグリッドデータであり、3次元データではないからです。

(c) WinGamess の DFTTYP は、\$DFT グループに属する項目ですが、GUI のスペースの都合で、PC GAMESS と同じく \$CONTRL グループに配置しています。

PC GAMESS と WinGamess に関して新たに加わった設定項目

Gamess の出力ファイルを開くとき、どちらの Gamess のインストールフォルダをカレントフォルダにするかは、Preferences>>ExternalPrograms の「For file opening, use PC GAMESS by default」で設定します。PC GAMESS をいつも使われる方は、チェックマークを入れて、WinGamess を使われる方は、チェックマークをはずしておく、ファイルを開く場合に便利です。

<<<=== 計算が異常終了した場合 ===>>>

WinGamess を Facio の子プロセスとして起動し、SCF 計算が収束しないなどにより異常終了した場合、出力ファイルである Facio.out へのアクセス権を WinGamess が解放しないため、Facio が Facio.out を開くことができず終了してしまいます。今のところ、Facio 側でどのように対処したらよいのかわかりません。なお PC GAMESS では、このような問題はありません。

<<<=== ファイヤーウォールに関する注意 ===>>>

gamess.04.exe および ddikick.exe は、TCP 接続を試みます。

初めて WinGamess を起動させたとき、ファイヤーウォールがインストールされている場合には、これらの TCP 接続を許可するかどうか尋ねられます。この場合は、「常に許可する」ように設定して下さい。「そのときだけ許可する」や「拒否する」に設定すると、永遠に計算ができません。

しかしながら「常に許可する」にしても、一番最初だけは、下記のようなエラーが output ファイルに出力され、計算は失敗します。恐らく、TCP 接続を許可するタイミングが遅いからだと思われますが、

次からは、問題なく計算できるはずです。

TCP connect error: ECONNREFUSED.

TCP: Connect failed. xxxxx -> xxxxx.yyyyy:1048.

(xxxxx, yyyyy の部分は、マシンのホスト名やドメイン名)

<<<<=== コマンドラインから起動する場合の注意 ===>>>>

Facio をインターフェイスにして使う限り全く問題になりませんが、
コマンドラインから直接 WinGamess を使う方は、以下のことにご注意下さい。

***** WinGamess の入力ファイルに関する注意 *****

WinGamess の入力ファイルの改行コードは、
Windows 形式の CR/LF ではなく、UNIX/Linux 形式の LF です。

改行コードを間違えると入力エラーが起こり、計算が始まりません。

```
##### この改行コードの問題は、VERSION = 7 SEP 2006 (R4) #####
##### では発生しなくなりましたが、 #####
##### VERSION = 11 APR 2008 (R1) では再び発生するようになりました。 #####
*****
```

したがって、普通にテキストエディタを使って作成した入力ファイルでは、絶対に計算ができません。WinGamess に同梱されている Utilities の batmaker.exe により入力ファイルの改行コードを Windows 形式から UNIX/Linux 形式に変換しなければなりません。(batmaker.exe は、もともと WinGamess の計算をするためのバッチファイルを生成するプログラムですが、入力ファイルの改行コードが Windows 形式になっている場合、修正するかどうかをユーザーに確認したうえで修正します。)

因みに、Facio では、WinGamess 用の入力ファイルを作成する際、最初から改行コードを UNIX/Linux 形式にしたものを出力しています。

この改行コードの違いはわかりにくいものです。
それは、ワードパッドや高級なエディタでは、改行コードが LF でも自動的に CR/LF に変換して表示してしまうからです。この点、「メモ帳」は、自動変換をしないので、UNIX/Linux 形式と Windows 形式の差がはっきりと見えます。バイナリーエディタだともっとはっきりわかります。

テキストエディタで入力ファイルを編集する場合に注意しなければならない点は、もともと改行コードが UNIX/Linux 形式のファイルであっても、編集・保存すると全部 Windows 形式に置き換わってしまうことです。
したがって、入力ファイルを編集する場合は、

- (I) 改行コードを自動変換しない「メモ帳」を使うか、
- (II) 編集後、batmaker.exe で改行コードを変換するか、
- (III) 保存改行コードを LF に設定できるようなエディタを使用する。
(このようなエディタとしては、例えば TeraPad がある。)

【基準振動の可視化（アニメーション表示）】

```
*****
* 基準振動の可視化を行うには、基準振動のデータが必要です。 *
* GAMESS では RUNTYP=HESSIAN により計算ができます。 *
*****
```

基準振動のデータは、GAMESS の出力ファイルと PUNCH ファイルの両方にありますが、フォーマットが違っており、Facio では PUNCH ファイルの方を読み込んで使っています。

Facio 6.5.1 以降では、赤外強度のデータを読むため、PUNCH ファイルを読むのと同時に、相当する出力ファイルのほうも読んでいます。もし、出力ファイルが PUNCH ファイルと同じフォルダにない場合は、赤外強度は読み込まれません。

基準振動のサンプルデータは、NormalMode というフォルダに同梱しています。

【分子軌道の可視化】

分子軌道の係数のデータは、GAMESS の Output ファイルと PUNCH ファイルの両方にありますが、フォーマットが違っており、また Output ファイルの方ではその全てが出力されているわけではありませんし、全くない場合もあります。そこで、Facio では、PUNCH ファイルの方を読み込んで使っています。この可視化は Facio が独自に 3D グリッドデータを作っているもので、MNDO, AM1, PM3, STO-3G, MINI にのみ実装されています。分子軌道のサンプルデータは、MolecularOrbitals というフォルダに同梱しています。

上述のような軌道の係数をもとに MO を表示する方法とは別に、Ver. 8.0.1 からは、PC GAMESS 6.4 の \$CUBE/Molecular Orbital データの可視化することができるようになりました。MO の 3D グリッドデータは、GAMESS が出力します。これにより、すべての Ab initio 計算の MO が可視化できるようになりました。

\$CUBE/Molecular Orbital を含むサンプルデータは、ファイルが巨大になるため同梱していません。

【遷移状態と IRC 計算の例】

エタンのメチル基の回転を例にとり、遷移状態と IRC 計算の手順を説明します。遷移状態を求めるための初期構造および遷移状態の PDB ファイルならびに GAMESS の出力ファイル等が、SaddleIRC というフォルダにあります。詳しくは、同フォルダ内の Japanese_SaddleIRC.txt を参照して下さい。

【分子モデリング概要】

モデリングは、水素原子をメチル基などの置換基で置換する方法で行っています。原子の種類の変更、結合の生成・削除、結合長・結合角・二面角の変更などの基本的な操作のほか、次のような機能を実装しています。

- (a) 二つの PDB 形式の分子構造データの読み込み、一つの PDB ファイルにマージする。この際、後から読み込んだ分子の相対位置や角度を調整することができる。またそれぞれの分子の任意の結合を直線上に並べることができる。

以上の一連の操作に続けて、原子の削除と結合の形成を行うことにより Facio では全ての PDB 形式の分子構造を「置換基」として扱うことができる。

- (b) GAMESS により構造最適化を行うことができる。
分子軌道計算は、半経験的分子軌道法 (AM1, PM3, MNDO) および Ab initio 法 (STO-3G etc.) による計算ができます。
- (c) 結合 A-B があつたとき、A もしくは B のグループ全体を結合長の変化に応じて結合軸に沿って移動することができる。
同様に、結合軸の周りに A もしくは B のグループ全体を回転させることができる。

結合 A-B-C があつたとき、A もしくは C のグループ全体を結合角 ABC の変化に応じて最初に A, B, C があつた平面内で移動させることができる。

【メニュー等の簡単な説明】

- (1) メインフォームの左右と下にあるスライドは、それぞれズーム、X軸の回りの回転、Y軸の回りの回転をするものです。
X軸は、モニター中心を通る横方向で、Y軸は、縦方向。
マウスのドラッグの動きとこれらのスライドは連動している。

Z軸はモニターに垂直な方向。

Shift キーを押しながら、マウスをドラッグすると Z 軸の周りに回転する。

Alt キーを押しながら、マウスをドラッグするとモニター平面内を平行移動します。
移動の度合いは、Facio.ini の TransSens で調製します。

(2) File メニュー

Load New PDB File

選択すると、ファイルオープンダイアログが現れ、適当な PDB ファイルを選択すると分子モデルが表示される。デフォルトでは、Facio の実行ファイルのあるフォルダーにある PDB という名前のフォルダー中にあるファイルがまず出てくる。

Load New Structure (other than PDB)

—— Cartesian Coordinate File

CC1, CC2 形式のファイルを読み込む。デフォルトでは、まず Facio の実行ファイルのあるフォルダにある CC というフォルダを探す。

—— Free Formatted / WebLab XYZ File

フリーフォーマット或は WebLab の XYZ ファイルを読み込む。

デフォルトでは、まず Facio の実行ファイルのあるフォルダにある XYZ というフォルダを探す。

—— MDL Molfile

MDL の Mol ファイルを読み込む。デフォルトでは、まず Facio の実行ファイルのあるフォルダにある MDL_Mol というフォルダを探す。

—— Tripos Mol2 File

Tripos の Mol2 ファイルを読み込む。

デフォルトでは、まず Facio の実行ファイルのあるフォルダにある Tripos_Mol2 というフォルダを探す。

—— CIF File

—— Facio Cartesian Coordinate File

—— Multi File (in Drag-and-Drop Mode)

Load New Gamess

—— Output for Optimized Geometry

GAMESS の計算結果を読み込む。ただし、構造最適化がうまくいき平衡構造が見つかったもののみモデルが表示される。Facio から計算を起動した場合の結果は、Facio.out および PDB ファイル名の拡張子を out にしたファイルに保存されている。

—— Punch for Normal Mode Vibration

GAMESS の PUNCH ファイルから、基準振動のデータを読み込む。PDB のファイル名の拡張子を pun にしたファイルが対応する PUNCH ファイルである。分子の座標も同時に PUNCH ファイルから読み込む。

—— Punch for \$VEC/Molecular Orbitals

GAMESS の PUNCH ファイルから、分子軌道の係数のデータを読み込む。PDB のファイル名の拡張子を pun にしたファイルが対応する PUNCH ファイルである。分子の座標も同時に PUNCH ファイルから読み込む。また、軌道エネルギーが相当する Output ファイルにある場合には、更にそれを読み込む。

\$VEC をもとに MO が表示できるのは、MNDO, AM1, PM3, STO-3G, MINI の場合のみ。

その他の基底関数を用いた場合は、
\$CUBE/Molecular Orbitals を使って下さい。

—— Punch for \$CUBE (ElDens and ElPot)

GAMESS の PUNCH ファイルから、電子密度と静電ポテンシャルのデータを読み取る。

—— Punch for \$CUBE (Molecular Orbitals)

GAMESS の PUNCH ファイルから、\$CUBE/Molecular Orbital データを読み込む。読み込まれたデータの表示は、Tools メニューの \$CUBE/Molecular Orbital Viewer を使う。

—— Extract Optimized Geometries from PC GAMESS Relaxed PES Scan Output

PC GAMESS の Relaxed PES Scan 計算の出力を読み込み、ポテンシャルエネルギー面の各点における最適化構造を読み取る。 Tools メニューの PES Scan Data Viewer でエネルギープロファイルや各点の構造をみる。

—— WinGamess Output for Bulk Model in SIMOMM Calc.

—— IRC Data

GAMESS の IRC ファイルから IRC データを読み込む。

—— Input for Cartesian Coordinate

—— Get \$HESS group (Hessian Matrix) from GAMESS Punch

GAMESS の PUNCH ファイルから, \$HESS (Hessian Matrix) を読み込む。

—— Get \$VEC group (MO coefficients) from GAMESS Punch

GAMESS の PUNCH ファイルから, \$VEC データを読み込む。

Load New Tinker xyz

Tinker の xyz ファイルを読み込む。

Facio から起動した Tinker-MM3 計算の結果は、計算終了後、自動的に読み込まれるので、このメニューコマンドを使う必要はない。

Load New Gaussian Output for Optimized Geometry

Gaussian の計算結果を読み込む。ただし、構造最適化がうまくいき平衡構造が見つかったもののみモデルが表示される。

Load and Append Another Molecule

—— by Drag and Drop (for all readable format)

—— with Open Dialog (for PDB only)

すでに表示されている分子の上にさらに別の分子の構造データを読み込み、一つの PDB ファイルにする。このコマンドを実行した直後には、最初の分子に対する二番目の分子の相対位置や角度を調節するためのパネルが現れる。

*** このコマンドにより、小さな分子を組み合わせる ***

*** 大きな分子のモデルを作成することができる。 ***

Save

現在表示されている分子の構造データを HETATM レコードと CONECT レコードのみで表現した PDB ファイルで保存する。ただし、ATOM レコードのある PDB ファイルの場合には、このコマンドは、使用できないようにしてある。これは ATOM レコードのあるタンパク質や核酸の PDB ファイルを意図せず HETATM レコードに変換して上書きしないようにするためである。

Save As

—— (HETATM/CONECT) format PDB

現在表示されている分子の構造データを HETATM レコードと CONECT レコードのみで表現した PDB ファイルで保存する。

—— Cartesian Coordinate 2

—— WebLab XYZ

—— Facio Cartesian Coordinate

—— GAMESS Input

—— Move Group with Angle Change

このモードでは、連続してクリックされた三つの原子の内、3番目の原子に直接あるいは間接的に結合しているグループ全体を結合角の変化に伴い移動させる。

—— Rotate Group Around Bond

このモードでは、連続してクリックされた二つの原子の内、後の原子に直接あるいは間接的に結合しているグループ全体を結合の周りに回転させる。

Replace H with

—— CH3

このモードでは、クリックした水素原子をメチル基で置き換える。他の置換基例えば水酸基(OH)を導入する場合は、メチル基の炭素を酸素に換え、水素を二つ除去する。

—— C(sp2)H2

水素原子を水素が二つ付いた sp2 混成の炭素で置き換える。

—— C(sp)H

水素原子を水素が一つ付いた sp 混成の炭素で置き換える。

—— Phenyl

水素原子をフェニル基で置き換える。

* 水素原子をクリックして導入できる置換基は、上の4種類だけだが、*
* 前述のように、Facio では PDB 形式で構造が表現された分子は全て *
* 置換基として扱うことができるので、特に問題はない。 *

—— Glycosyl

水素原子を種々のグリコシル基で置換する。このモードを選択後、水素原子をクリックするとグリコシル基を選択するためのパネルが現れる。

—— OH

水素原子を水酸基に置換する。

—— Formyl

水素原子をホルミル基に置換する。

—— NH2

水素原子をアミノ基に置換する。

—— User Defined Substituent

ユーザー定義の置換基を使用する。

Align Four Atoms

このモードになっているときは、連続してクリックされた四つの原子を直線上に並べる。Load and Append Another PDB File コマンドで二番目の PDB ファイルが読み込まれたときに使用できる。

Modify

—— Bond Length

連続してクリックされた二つの原子の間の距離だけを変更する。他の原子の位置は変更されない。

—— Bond Angle

連続してクリックされた三つの原子の成す角度だけを変更する。

—— Dihedral Angle

連続してクリックされた四つの原子の成す二面角だけを変更する。

Enable Safety Mode

Open Edit Tool Box

分子モデリングでよく使う Edit メニューを集めた Edit Tool Box を表示させます。

Z-Matrix Editor

Delete Duplicate Atoms

(4) Models メニュー

Ball and Stick

玉と棒によるモデル

CPK (Space Filling)

van der Waals 半径の球で各原子を表現したモデル

Stick

—— Plain

玉と棒によるモデルで玉の径が棒と同じになったもの。

—— With Dotted Molecular Surface

溶媒排除表面を表すドットと分子の骨格を表す棒によるモデル

—— With Marbled Molecular Surface

溶媒排除表面を表す小さな玉と分子の骨格を表す棒によるモデル

Wire

—— Plain

結合を線のみで描画したモデル。

タンパク質や核酸の場合は、これが自動的に default となる。もちろんタンパク質や核酸でも Ball and Stick モデルで表示ができるが、マシンの能力によっては表示がとても遅くなる。

—— Rainbow

全結合を 7 分割し、それぞれ色を換えて 7 色で表現したワイヤーモデル。

—— Colored by Quaternary Structure

タンパク質や核酸のドメイン構造を色分けして表示するモデル

—— Colored by Secondary Structure

タンパク質の二次構造を色分けして表示するモデル

α ヘリックス \Rightarrow 赤

β シート \Rightarrow 黄

β ターン \Rightarrow 緑

—— With Dotted Molecular Surface

溶媒排除表面を表すドットと分子の骨格を表すワイヤーによるモデル

—— Trapezoidal Quad for Protein

タンパク質の新しい粗視化表示法。それぞれのアミノ酸残基は、台形で表現される。台形を構成する 4 つの点は、アミドカルボニルの酸素、アミドカルボニルの炭素、 α 炭素、

およびアミドの窒素である。

- Different Colors for Two Molecules
2つの分子を比較する場合、色を違えて表示する。

(5) Preferences メニュー

Molecular Model

- Atom Properties
原子を表す玉の色や径を調節する

- Bond Properties
結合を表す棒の色や径を調節する

- Graphics Quality
玉や棒をどれだけ分割して描画するかを設定する。分割数が大きくなるほどきれいな玉や棒になるが、原子数の多い分子では、描画が遅くなる。タンパク質を Ball and Stick 表示させる場合は、描画速度の関係で、Graphics Quality が自動的に低く設定される。Wire Frame 表示には、Graphics Quality は無関係。

- Orthographic Projection
正射影による表示を行う。この射影モードは、例えば、平行に重なったベンゼン環の重なり具合を微調整する場合に有効。

External Programs

PC GAMESS と WinGamess と MSMS と TINKER の実行ファイルの絶対パスを含む名前を設定する。TINKER に関しては、ペプチド用の Force Field パラメータファイルも指定する。Browse ボタンをつけているので、これによりフォルダ内を移動し実行ファイルを指定するとよい。GAMESS の出力ファイルを開く場合、GAMESS を種類を PC GAMESS にするか、WinGamess にするかをここで選択する。

Surface

- Molecular Surface Properties
溶媒排除表面を表すドットの色や大きさを設定する。
- Molecular Orbital Properties
分子軌道のローブの色や、Dot Surface での小さな玉の径を設定する。
- Isosurface Properties
等電子密度、等ポテンシャル表面の色を設定する。

SSH / SFTP Connection Properties (Facio 21.1.1 より廃止しました) SSH / SFTP 接続のためのサーバーやユーザー名を設定する。

Other Preferences

- Background Color
背景の色を調節する
- Arrow Properties
基準振動や双極子モーメントを表現する「矢」の属性の調整
- Spinning Rate
分子を自動的に回転させて表示するときの回転速度を設定する。

----- Label Properties

原子の通し番号をラベルとして表示する時の色を設定する.

Linux-WINE Mode

Save Current Properties

現在の色などの設定が Facio.ini に保存さる. Facio は起動時に Facio.ini を読み込み設定を行う. したがって, ユーザーの好みの設定は, Facio.ini に保存することになる. Facio.ini はテキストファイルなのでテキストエディタで編集可能.

Load Default Properties

DefaultFacio.ini から Facio のデフォルトの設定値を読み込む.

Save Position

メインウィンドウの位置とサイズおよび Worksheet の位置を Facio.ini に保存する.

Show Only Symmetry Unique (for GAMESS)

Gaussian Coordinate System : Input Orientation

Gaussian Coordinate System : Standard Orientation

Reset Current Directory of PDB

(6) Miscellaneous メニュー

Worksheet

----- Show

Facio からのメッセージを表示する Facio's Worksheet を表示させる.

----- Erase

Worksheet のメッセージを消去する. これは, Worksheet にある文字列が 32KB を超えるとそれ以上表示できなくなるのを防ぐため. ただし, 文字列が 32KB に近くなったかどうかは Facio の方ではモニターしていない.

Show

----- Coordinate Axis

座標軸を表示する. X 軸 (黄色), Y 軸 (水色), Z 軸 (黄緑色)
-X 軸, -Y 軸, -Z 軸 (白色)

----- Selected Atom Number

原子をクリックしたとき, その原子が持つ番号を表示する.

----- Numeric Labels

原子の番号を原子の近傍に表示する.

----- Atom Symbols

----- _atom_site_label of CIF

----- Guides

----- Dipole Moment

双極子モーメントを矢印表示する.

----- Hydrogen Bonds

水素結合を表示する.

Highlight

- Highlight Specified Atom
原子の番号を指定すると、黄色の箱で囲まれて表示される
- Highlight PDB Residue Sequence (Ver.18.4.1 より, FMO メニューの PDB Utilities に移動
指定したアミノ酸残基を黄色でハイライト表示する.

Skip Hydrogen Bond Detection

Centering and Zoom

- Auto Centering
置換基を導入したとき、自動的に全原子の平均位置を中央に移動させる.
- Auto Centering OFF for Protein and Nucleic Acid (Ver.12.1.2 より削除)
タンパク質や核酸に対して Auto Centering 機能を Off にする.
- Auto Zoom
分子の大きさに応じて自動的にズームを調整する.
- Zoom Position → 0
ズームの位置をゼロにする.

Verbose

Facio が出すメッセージをより多くする.

Quaternary Structure Visibility

タンパク質の四次構造や核酸の二本の鎖の表示・非表示をコントロールする. 表示モデルが Wire (colored by Quaternary Structure) の場合にのみ使用できる.

Secondary Structure Visibility

タンパク質の二次構造 (Helix, Sheet, Turn) の表示・非表示をコントロールする. 表示モデルが Wire (colored by Secondary Structure) の場合にのみ使用できる.

Invoke Molekel

Molekel を起動します.

Show Screenshot Capture

メイン画面のスクリーンショットを撮るためのボタンを表示させます.

Show Periodic Table of the Elements 元素の周期表を表示する.

- Ordinary Type
- In Kanji (Traditional Chinese Characters)

Summarize Energy/Grad/Geometry Changes

構造最適化の過程におけるエネルギー変化をグラフ表示

(7) Utilities メニュー

Dump

- Connectivity
結合情報をテキストファイルに保存する.
- Geometric Information (Bond Length, Angle, Dihedral Angle)

- Hydrogen Bonds
水素結合に関与する原子や結合距離のリストを出力する。

- ##### Geometric Comparison
 - Load Two Molecules for Geometry Comparison
 - Geom. Diff. of 1st and 2nd Molecules (by Approximity)
File メニューの「Load and Append Another PDB File」で読み込んだ2つの分子の対応する結合長，結合角，二面角の差を表にして出力する。対応する原子の判定は，原子間距離によって行う。Facio.ini の ApproximityCriteria4DumpDif が判定基準であり，これ以下の距離にある原子どうしを対応する原子として判断する。従って，この方法を用いる場合には，2つの分子を出来るだけ重なるようにしておく。
 - Geom. Diff. of 1st and 2nd Molecules (by Connectivity)
機能は，上のものと同じ。対応する原子は，結合情報により決定されるので，2つの分子を重ね合わせる必要は無い。
 - RMS Fit by Quaternion Method
Quaternion 法により，RMS が最小になるような重ね合わせをおこなう。
 - Calculate RMSD

- ##### Spin About
 - X Axis
X 軸（モニターの横方向）に関して分子を自動回転させる。
 - Y Axis
Y 軸（モニターの縦方向）に関して分子を自動回転させる。
 - Z Axis
Z 軸（モニターに垂直な方向）に関して分子を自動回転させる。

- ##### Interatomic Distance
連続してクリックした二つの原子の間の距離を Worksheet に表示する。

- ##### Bond Angle
連続してクリックした三つの原子が成す角度を Worksheet に表示する。

- ##### Dihedral Angle
連続してクリックした四つの原子が成す二面角を Worksheet に表示する。

- ##### Adjust Position and Tilting Angle
座標軸に関する平行移動と分子の局所座標での回転分子を見る方向や正射影にする機能は，このメニューを選択して表示されるパネルの中にもあります。

- ##### Move Whole Molecule
 - To Center
分子全体を画面の中央に移動させる。
 - by Setting Specified Atom to Center
クリックした原子を画面の中央に移動させる。
 - by Setting Specified Atoms to Axis / Plane
指定した原子が座標軸 / 平面に来るように分子を移動させる。

- by Performing Principal Axes Transformation of Inertia Moment
分子の慣性モーメントを求め、主値の小さい順に X, Y, Z 軸となるように、主軸変換を行う。縮重のある場合には、変換を行わない。
- Reflection in XY Plane
XY 平面を対称面として鏡象をつくる。
- Reflection in YZ Plane
YZ 平面を対称面として鏡象をつくる。
- Reflection in ZX Plane
ZX 平面を対称面として鏡象をつくる。
- ##### Impose Point Group Symmetry
 - with Symmetrizer at Tolerance = 0.1 (default)
 - with Symmetrizer at Tolerance = 0.5 (loose)
 - with Symmetrizer at Tolerance = 1.0 (very loose)
外部プログラムの Symmetrizer との連携
 - by Applying Every Symmetry Operation One by One
指定した対称になるように構造を変形する
- ##### View
 - Along X Axis (yellow)
分子を X 軸方向から見る
 - Along Y Axis (cyan)
分子を Y 軸方向から見る
 - Along Z Axis (green)
分子を Z 軸方向から見る
 - Open View Point Controller
- ##### Forced Move
 - To XY Plane (sigma-h plane)
ProximityCriteria (default=0.6 angstrom) 以内の原子を XY 平面に正確に移動させます。ProximityCriteria は、Facio.ini で設定されています。
 - To XZ Plane (sigma-v plane)
ProximityCriteria 以内の原子を XZ 平面に正確に移動させます。
 - To Z Axis (principal rotation axis)
ProximityCriteria 以内の原子を Z 軸上に正確に移動させます。
 - To Y=X Plane
ProximityCriteria 以内の原子を直線 Y=X 上に正確に移動させます。
- ##### Complete
 - Missing Bonds
結合の無い孤立原子に結合を作る。

- Missing Hydrogen Atoms (by HETATM/CONECT Record)
不足している水素原子を推定し，補完します．タンパク質の PDB データの水素補完を想定して実装していますが，通常の有機分子のモデリングにも利用できます．タンパク質中の孤立酸素原子は，水分子として認識されます．

Reassign Atom Numbers

原子の番号を付け替えるユーティリティを起動する．

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．

Find

- TER Record in PDB

PDB ファイルにある TER レコードを見つけて表示する．

- Closely Located Atoms

指定した原子の近傍にある原子を見つけて表示する．

- Isolated Atom

- Small Interatomic Distance

- H atom which has two bonds

結合が 2 本ある水素原子を見つける．

(8) Calculations メニュー

Firefly (PC GAMESS)

GAMESS の計算オプションを設定したり，計算を実行するパネルが表示される．

このコマンドは，Preferences メニューの External Programs で，実行ファイルの絶対パスを含む名前を設定し，なおかつ GAMESS の実行ファイルが実際に存在する場合にのみ使用できる．パスは，Preferences メニューの External Programs で設定して下さい．ただし，PC GAMESS の実行ファイルは，ルートフォルダに置かないようにして下さい．PC GAMESS は仕様として，ルートフォルダでは実行できないようになっています．

計算の実行には，次の二つのモードがあります．

(a) 計算を始めたらず終了するまで待つモード．

計算が終了すると，結果を自動的に読み込み，平衡構造が得られている場合には，その構造を表示する．ただし，計算の途中で Facio を終了することができない．これは，半経験的分子軌道法の計算など時間があまりかからないときのオプション．

(b) 計算を始めたらず，いつでも Facio を終了できるモード．

計算結果（ファイル名は，PDB ファイル名に拡張子 out が付いたもの）を読み込むことにより構造が表示される．これは，Ab initio 計算など時間が非常にかかるときのオプション．

計算に先立ち，Facio は入力ファイル INPUT と計算用のバッチファイル Facio.bat を作り，計算を実行する．もとの PDB ファイルが ABC.pdb の場合，計算終了時には，以下のファイルが生成される．

Facio.out

PUNCH
ABC.out (Facio.out のコピー)
ABC.pun (PUNCH のコピー)

MSMS (Molecular Surface)

MSMS の計算オプションを設定したり，計算を実行するパネルが表示される。
実行ファイルの絶対パスを含む名前を設定し，なおかつ MSMS の実行ファイルが実際に存在する場合にのみ使用できる。

パスは，Preferences メニューの External Programs で設定した後，Save Current Properties で設定を保存してください。

計算に先立ち，Facio は入力ファイル Facio.xyzr と計算用のバッチファイル Facio.bat を作り，計算を実行する。結果は，Facio.face と Facio.vert に保存される。計算が正常に終了すると，Models メニューの Dot Surface and Stick および Dot Surface and Wire が Enable になる。計算中は，Facio を終了しないで下さい。計算時間は短いのでしばらく待って下さい。

TINKER-MM3 (Molecular Mechanics)

TINKER-MM3 の計算が自動的に始まり，計算終了後には最適化された構造が自動的に表示されます。MM3 による構造最適化は，大環状化合物や高次フラレン類のモデリングに特に有用です。

WinGamess

入力オプションパネルは，PC GAMESS とほとんど同じ。ただし，WinGamess では使うことのできない \$CUBE 等は Disabled になっている。

SIMOMM Layer

WinGamess/Tinker (MM3) による SIMOMM 計算のレイヤーの設定

Gaussian

Gaussian の入力ファイル作成および起動用のパネルが開く。

Gaussian Utilities

Gaussian Utilities の起動

ONIOM Layer

ONIOM レイヤー設定用 GUI が開く

UTChem

UTChem の入力ファイル作成用の GUI を起動する。ジョブの起動もこの GUI からできる。

MOPAC

MOPAC の入力ファイル作成用の GUI を起動する。ジョブの起動もこの GUI からできる。

(9) Tools メニュー

Viewers

—— Normal Mode Vib. Viewer

基準振動のアニメ表示を制御するパネルが表示される。基準振動のデータが読み込まれている場合にのみ選択できる。

— 使い方 —

(1) Normal Mode 番号を指定する

(2) 振動の半周期でのアニメフレームの数を指定する。default は10フレーム。本来は、フレームの数を増やすと動画が滑らかになることを意図しているが、実際には10で十分滑らかで、それ以上にしても滑らかさはあまり変わらず、遅いマシンではむしろ、動きがゆっくりになるという効果がある。

Ver. 4.7.1 以降、OpenGL による描画を改良したため、それまでの default の5では、動きが速すぎる場合がありますので、default 値を10にしました。

(3) Start/Shift Frame ボタンをクリックするとアニメがスタートする。

(4) Stop frame by frame にチェックマークを入れておくと、各フレームごとに画像が止まる。Start/Shift Frame ボタンで次のフレームへ移動する。

止まった画像をそれぞれ、Alt-Print Screen でキャプチャーすると GIF アニメの素材にすることができる。

—— 以下のボタンは、IR 強度のデータが読み込まれている場合にのみ実行可能 ——
(Facio 6.5.1 以降の機能)

(5) Open IR Spectrum Window ボタンをクリックするとシュミレーションされた IR スペクトルが表示される。

IR 強度のデータは、punch ファイルではなく、相当する output ファイルの方にあります。Facio は、output ファイルが punch ファイルと同じフォルダにあるものとして output ファイルの読み込みを自動的に行っている。

—— \$VEC/Molecular Orbital Viewer

分子軌道の表示を制御するパネルが表示される。

分子軌道のデータ（軌道の係数）が読み込まれている場合にのみ選択できる。

— 使い方 —

(1) 分子軌道の番号を指定する。default では、その分子の HOMO になっている。

(2) Calculate MO Lobe and show をクリックすると分子軌道が表示される。基底関数の数が多くなると、計算に時間がかかり 200 個位では1分以上になることもある。

(3) 軌道エネルギーのデータがある場合には、MO Energy のところに表示される。GAMESS では、基底関数の数が10以上の場合は、基底関数の数+10までの MO しか出力されないようなので、エネルギーの高い空軌道では、その軌道エネルギー

一の値は、わからない。その場合には、0 が表示される。

- (4) Isosurface Value は、表示すべき分子軌道の値を設定する。格子点として求めた分子軌道を表示するかしないかは、Isosurface Value と Surface Thickness で決めている。

正の位相では、

$\text{Isosurface Value} < P(x, y, z) < \text{Isosurface Value} + \text{Surface Thickness}$

負の位相では、

$-\text{Isosurface Value} - \text{Surface Thickness} < P(x, y, z) < -\text{Isosurface Value}$

の間にある格子点 $P(x, y, z)$ を表示している。

- (5) Marbled surface representation チェックボックスはローブの表示を小さな玉で表示するかどうかを決める。

- (6) Point Size = 2 チェックボックスは、ポイントサイズ 2 でローブを点描します。分子を拡大した状態で分子軌道を表示させたとき点が小さ過ぎて見難い場合に使用します。

- (7) Mesh surface にチェックマークを入れると等値表面がメッシュ表示になります。

—— 以下の二つのボタンは、半経験的分子軌道計算の場合にのみ使用できる ——
(Facio 6.5.1 以降の機能)

- (8) Calculate Electron Density with Semiempirical MOs 半経験的分子軌道の係数をもとに全電子密度を計算する。計算が終了すると、Tool メニューの ElDens and ElPot Viewer が使用できるようになる。

- (9) 計算した電子密度のデータを GAMESS の CUBE データのフォーマットで保存する。ファイル名は、CalcElDens.txt に固定してある。このファイルを Punch ファイルに付けると CUBE データとして読み込むことができる。

—— ElDens and ElPot Viewer

等値表面の表示を制御するパネルが表示される。

電子密度もしくは静電ポテンシャルが読み込まれている場合にのみ選択できる。

電子密度もしくは静電ポテンシャルは、GAMESS 入力オプションで ELDENS もしくは ELPOT にチェックマークを入れなければ、Punch ファイルに出力されない。

また、MND0, AM1, PM3 の場合は計算されない。Facio 6.5.1 以降では、半経験的分子軌道から直接、全電子密度を計算できるようになった。

— 使い方 —

- (1) 電子密度、静電ポテンシャルのどちらを表示するかを選択する。
- (2) 等値表面の値を決める。
- (3) 表面の厚みを決める。このパラメータは、等値表面の値が変化すると自動的に変わるが、その値の 10 分の一から 50 倍まで変化させることができる。

(4) Calculate Isosurface and Show ボタンをクリックする。

(5) Mesh surface にチェックマークを入れると等値表面がメッシュ表示になります。
等値表面を表すドットの色は、Preferences メニューの Isosurface Properties
で変えることができる。

—— IRC Data Viewer

IRC 計算で得られた一連の構造を表示する。

—— CUBE/Molecular Orbital Viewer

分子軌道の表示を制御するパネルが表示される。

CUBE/Molecular Orbital データが読み込まれている場合にのみ選択できる。

CUBE/Molecular Orbital は、PC GAMESS 6.4 の新機能。

使い方は、VEC/Molecular Orbital Viewer に準ずる。

—— Gaussian ADMP/BOMD Trajectory Viewer

Gaussian の ADMP/BOMD 計算で得られた一連の構造を表示する。

IRC 計算で得られた一連の構造を表示する。Trajectory データを含む Gaussian
Formatted Check File が読み込まれている場合にのみ選択できる。

—— NMR Data Viewer

Tools メニューの Load WinGamess Output for NMR Shielding Tensor 又は Load Gaussian
Output for NMR Shielding Tensor でファイルを読み込むと選択できます。

—— PES Scan Data Viewer

File メニューの Extranc Optimized Geometries from PC GAMESS Relaxed PES Scan Output
でファイルを読み込むと選択できます。

Builders

—— Polypeptide Builder

ポリペプチドの作成に必要な TINKER の実行ファイル (Protein.exe) とポテンシャルフ
ァイルが存在する場合にのみ表示される。

— 使い方 —

(1) アミノ酸残基のボタンにより、ポリペプチドの並びを作る。

それぞれの残基に対して二次構造を指定することにより、あらかじめ設定された
Phi, Psi, Omega が設定される。例えば、Helix (Alpha Helix) を指定すると、Phi,
Psi, Omega は、それぞれ -57, -47, 180 に設定される。

(2) "Terminate", "Cyclize", "NME", "NH2" ボタンにより、ポリペプチドの並びに末
端を設定する。

(3) "Build" ボタンにより、ペプチドのモデルを作成する。TINKER がモデルの座標を
発生させている。

(4) "Minimize"あるいは"Optimize"ボタンにより, 構造を最適化する.

(5) (3), (4) の過程で生成する TINKER の出力ファイル (XYZ フォーマット) は, "Facio.xyz"に固定されているので, 違うファイル名で保存したい場合には, Save As テキストボックスにファイル名を入れておく.

----- Polynucleotide Builder

核酸の作成に必要な TINKER の実行ファイル (Nucleic.exe) とポテンシャルファイルが存在する場合にのみ表示される.

— 使い方 —

(1) らせんの型を決めた後, ヌクレオチド残基のボタンにより, ポリヌクレオチドの並びを作る.

(2) "Terminate", ボタンにより, ポリヌクレオチドの並びに末端を設定する.

(3) "Build"ボタンにより, 核酸のモデルを作成する. TINKER がモデルの座標を発生させている.

(4) "Minimize"あるいは"Optimize"ボタンにより, 構造を最適化する.

(5) (3), (4) の過程で生成する TINKER の出力ファイル (XYZ フォーマット) は, "Facio.xyz"に固定されているので, 違うファイル名で保存したい場合には, Save As テキストボックスにファイル名を入れておく.

Cross Section Controller for CUBE MO
CUBE MO の任意の断面を設定するパネル.

Load Gaussian

----- Load Gaussian Cube for MO(s) (in single file mode)
----- Load Gaussian Cubes for MOs (in multi file drag and drop mode)
----- Load Gaussian Output for Normal Mode Vib.
----- Load Gaussian Cube for Electrostatic Potential.
----- Load Gaussian Cube for Density
----- Load Gaussian Formatted Checkpoint for IRC
----- Load Gaussian Formatted Checkpoint for Trajectory
----- Load Gaussian Formatted Checkpoint for Geometry

MO Levels Graphical Viewer

----- Alpha MO
----- Beta MO

NMR Shielding Tensor

----- WinGamess
----- Gaussian

Load UTChem Output for Geometry

Load MOPAC

----- Output for Normal Mode Vibration

MOPAC6, MOPAC93, MOPAC2000, WinMOPAC3.0, 3.5, 3.9 の FORCE 計算で得られる基準振

動のデータを読み込む。基準振動のアニメーション表示は、Tools メニューの Normal Mode Vib. Viewer から。

—— Output for Optimized Geometry and MO

Gaussian/AMBER Utility
TINKER-MM Input File Maker
Load MSMS vertex (*.vert)
Tetrahedron Drawer
Box Drawer

(10) FMO メニュー (バージョン1.1より新設)

FMO (Gamess) Control Panel
FMO フラグメントの自動・手動分割と入力ファイルの自動作成

Local Structure Viewers

—— #1
タンパク質などの巨大で複雑の分子の部分構造を見るためのビューアー。
独立した4画面がある。

—— #2
—— #3
—— #4

PDB Utilities

—— Residue Sequence Viewer
—— Extract MODEL
—— Delete Alternate Location (Atom Variant) of PDB
—— PDB Atom Name Field Converter
—— Add Hydrogen Atoms to Protein PDB by ATOM record
—— Point Mutation
—— Add Hydrogen Atoms to Nucleic Acid PDB by ATOM record
—— Translate to Center (+ Offset)
—— PDB Atom Name Field Converter (for Xleap/AMBER)
—— Find Contacting Waters
—— Find Contacting Waters (in Multi Job Mode)

—— Make Serial Number Serial
—— Delete TER Record Serial Number and Renumber

Load GAMESS/FMO Output

Make FMO Output Difference

Save PIEDA in Gamess Output Format

Select FMO Version (FMO 4.1, 5.3, 5.4, 5.5)

(11) ELG メニュー (バージョン2.6より新設)

Elongation Method Input

Clip Unit and Make Model by Unit Stacking

Make Model by Unit Stacking

Compare ELG/Conv Output

Visualize Loca DOS

Visualize Local Normal Mode of Vibration

【外部プログラム】

Facio は、外部プログラムとして次の 8 つを使用していますが、Facio の中から起動し結果を表示するだけで、これらのプログラムに何ら変更を加えてはいません。

<<< 注意 1 >>>

外部プログラムをルートフォルダ (C:¥¥や D:¥¥) に置くと計算ができませんので、何かフォルダーに入れて置くようにして下さい。

<<< 注意 2 >>>

大学の情報処理施設などのように、個人のアカウントとパスワードでログインしてから使用する Windows 環境の場合、

PC GAMESS をリモートディスク (ネットワークディスク) に置くと計算できません。必ずローカルディスク (通常 C:¥¥) に置いて下さい。大学によっては、ログアウトすると、ユーザーがローカルディスクにコピーしたものは全て消去される設定になっている場合があります。そのような環境では、ログイン毎に PC GAMESS の再コピーが必要です。MSMS は、リモートディスクに置いていても計算ができるようです。

(1) 分子軌道計算 Firefly (PC-GAMESS) および WinGamess

Intel x86 (Win32, Linux, OS/2, DOS) VERSION
copyright (c) 1994, 2000 by Alex. A. Granovsky,
Laboratory of Chemical Cybernetics,
Moscow State University, Moscow, Russia.
Some parts of this program include code due to
work of Jim Kress, Peter Burger, and Robert Ponec.

<http://classic.chem.msu.su/gran/gameess/index.html> (Firefly home page)

GAMESS is maintained by the members of the Gordon research group
at Iowa State University.

<http://www.msg.ameslab.gov/gameess/download.html>

(GAMESS の文献)

M. W. SCHMIDT, K. K. BALDRIDGE, J. A. BOATZ, S. T. ELBERT,
M. S. GORDON, J. H. JENSEN, S. KOSEKI, N. MATSUNAGA,
K. A. NGUYEN, S. J. SU, T. L. WINDUS,
TOGETHER WITH M. DUPUIS, J. A. MONTGOMERY
J. COMPUT. CHEM. 14, 1347-1363 (1993)

(FMO method in GAMESS の文献)

D. G. Fedorov, K. Kitaura, J. Chem. Phys. 120, 6832 (2004).

*** PC GAMESS を論文で引用する場合は、次のようにして下さい。 ***

... calculations were performed using
the PC GAMESS version [1, 2] of the GAMESS (US) QC package [3]

- [1] A. A. Granovsky, PC GAMESS version 7.0,
<http://classic.chem.msu.su/gran/gamess/index.html>
- [2] A. V. Nemukhin, B. L. Grigorenko, A. A. Granovsky
Molecular modeling by using the PC GAMESS program:
From diatomic molecules to enzymes
Moscow University Chemistry Bulletin.
2004, Vol. 45, No. 2, P. 75.
- [3] M. W. Schmidt, K. K. Baldridge, J. A. Boatz, S. T. Elbert, M. S. Gordon, J. J. Jensen,
S. Koseki, N. Matsunaga, K. A. Nguyen, S. Su, T. L. Windus,
M. Dupuis, J. A. Montgomery,
J. Comput. Chem. 14, 1347-1363 (1993)

(2) 溶媒排除表面の計算 MSMS

別途に下記のサイトよりダウンロードしてください。

<http://mgltools.scripps.edu/downloads#msms>

(MSMS の文献)

Sanner, M. F., Spohner, J.-C., and Olson, A. J. (1996)
Reduced surface: an efficient way to compute molecular surfaces.
Biopolymers, Vol. 38., (3), 305-320.

(3) 分子力学計算, ペプチドのモデリング TINKER

別途に下記のサイトよりダウンロードしてください。

<http://dasher.wustl.edu/tinker/>

(TINKER の文献)

P. Ren and J. W. Ponder, J. Phys. Chem. B, 107, 5933-5947 (2003)
R. V. Pappu, R. K. Hart and J. W. Ponder, J. Phys. Chem. B, 102,
9725-9742 (1998)

M. E. Hodsdon, J. W. Ponder and D. P. Cistola, J. Mol. Biol., 264,
585-602 (1996)

M. J. Dudek and J. W. Ponder, *J. Comput. Chem.*, 16, 791-816 (1995)
C. E. Kundrot, J. W. Ponder and F. M. Richards, *J. Comput. Chem.*,
12, 402-409 (1991)

J. W. Ponder and F. M. Richards, *J. Comput. Chem.*, 8, 1016-1024 (1987)

(4) 分子軌道計算 (Gaussian 03W, 09W, 16W)

<http://www.gaussian.com/>

このソフトだけは商用ですので、別途購入してください。

(5) 分子軌道および分子動力学計算 (UTChem)

UTChem は、東京大学の平尾研究室により開発された分子理論計算プログラムパッケージですが、現在ではソフトウェアの配布がなされていないようです。

(6) 分子軌道計算 (MOPAC2016)

MOPAC2016 はオープンアクセスとなり、ライセンスが不要になりました。

http://openmopac.net/Download_MOPAC_Executable_Step2.html

(7) Symmetrizer

"Symmetrizer: Algorithmic Determination of Point Groups in Nearly Symmetric Molecules"

R. J. Largent, W. F. Polik, J.R. Schmidt,

J. Comput. Chem. 2012, 33, 1637-1642. DOI: 10.1002/jcc.22995

<https://www.chem.hope.edu/~polik/software.htm>

symmetrizer.jar は Facio.exe のあるフォルダに置いて下さい。

【最後に】

再配布は自由ですが、ドキュメントやサンプルを含んだ元の ZIP アーカイブの形で配布していただくようお願い致します。

また、Facio を論文等で引用される場合は、下記のようにお願い致します。

M. Suenaga, *J. Comput. Chem. Jpn.*, Vol. 4, No. 1 pp. 25-32 (2005)

M. Suenaga, *J. Comput. Chem. Jpn.*, Vol. 7, No. 1 pp. 33-53 (2008)

令和 7 年 7 月 31 日

末永正彦

九州大学理学研究院化学部門 (令和 6 年 3 月 31 日をもって定年退職)

E-mail: zzzfelis@icloud.com

Facio's website: <http://zzzfelis.sakura.ne.jp>

YouTube: <https://www.youtube.com/channel/UCxrY98GxF6BU6hJ6OWjkEFg>
