

Facio による計算化学入門

＜分子モデリングと計算結果の可視化＞

1. 計算化学統合環境 **Facio** の概要
2. 分子モデリングの概要
3. **Facio** による分子モデリングの基礎
4. 分子モデルの微調整
5. 二分子の連結によるモデリング
6. 対称性を利用したモデリング
7. ペプチド・核酸のモデリング
8. 生体高分子の構造
9. **GAMESS** の入力オプション
10. 分子軌道の表示
11. 静電ポテンシャルマップ
12. 基準振動と赤外スペクトル

- 付録A ソフトウェアのインストール
B 分子モデリングの演習問題

九州大学理学院・化学部門 末永正彦

zzzfelis@chem.kyushu-univ.jp
<http://www1.bbiq.jp/zzzfelis/>

【1】計算化学統合環境 Facio の概要

計算化学とは、コンピュータを使い分子の安定な構造を求めたり、反応性を調べたり、化学反応を研究する理論化学の一分野です。ここでは、いろいろな計算化学用のソフトウェアを使う上で中心となる Facio というソフトウェアについて、その概要を述べます。

計算化学統合環境ソフトウェア Facio は、分子力学計算パッケージである Tinker や溶媒排除表面を計算する MSMS や分子軌道計算ソフトウェアである GAMESS や Gaussian を使い易くするための環境を提供しており、その大まかな関係は下図のようになります。即ち、Facio は分子のモデリングを行い、そのデータを適切な入力データの形にして、それぞれの計算ソフトに引渡し計算を開始します。得られる計算結果は、数値データであるため、このままでは理解し難い。そこで数値データをグラフィックスで表現する必要がありますが、この作業を Facio が行います。このように、Facio は種々の計算化学ソフトを使い易くするための前処理や後処理およびインターフェイスの役割を果たしています。分子モデリングと計算ソフトの間の矢印が両矢印になっていますが、これは計算ソフトと連携しながら、即ち計算結果を使いながらモデリングを行っていることを意味しています。

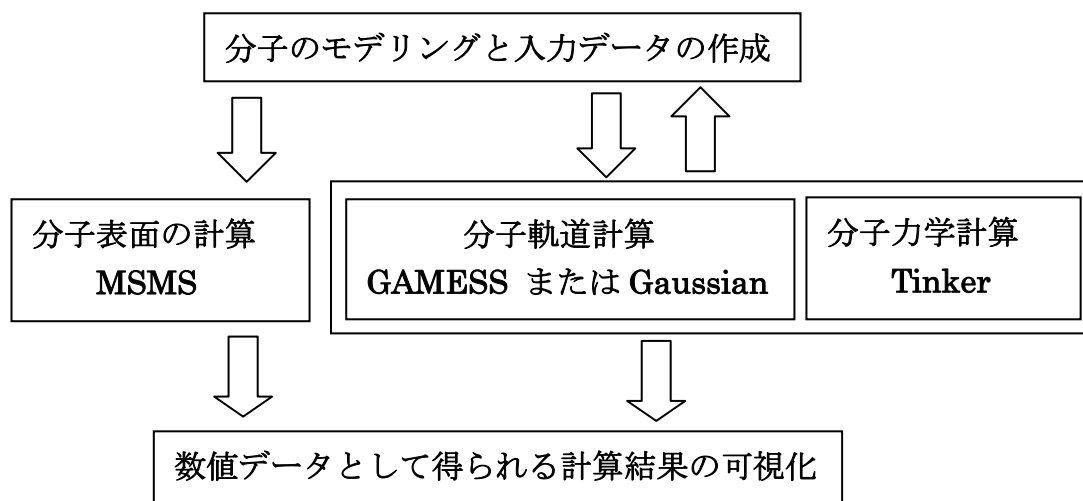


Figure 1-1

この計算化学演習では、GAMESS と Tinker と Facio を中心にして計算化学の基礎的な事項を学んで行きます。前半は分子モデルの作成が主になりますが、モデルを構築する際、分子軌道法や分子力学と連携しながら行います。後半は、分子軌道法をもう少し詳しく見ていきます。

Facio は、機能別に分けられた数多くの Window からできていますが、常に表示されている重要な Window は、下に示す二つのものです。左側の Window には、文字情報が表示され、右側のものにはグラフィックスの情報が表示され、モデリングや分子軌道の表示などはこの Window で行われます。

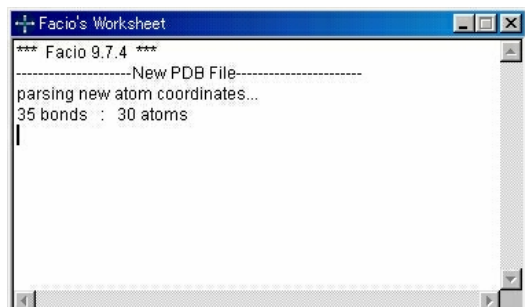


Figure 1-2

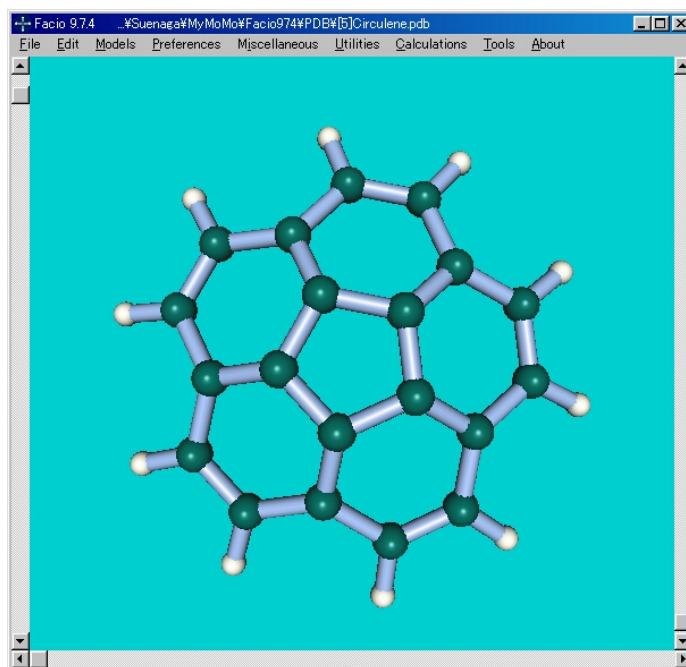


Figure 1-3

Window の上端には、取り扱っているファイル名が表示されます。

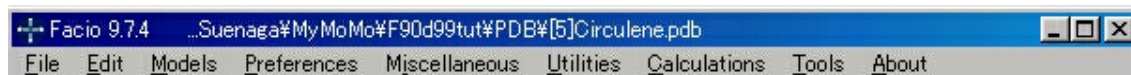


Figure 1-4

メニューバーは、9 個のメニューから構成されています。

- | | |
|-----------------------|-------------------------------------|
| 1. File メニュー | 分子構造、計算結果等のファイルを開いたり、分子モデルを保存したりする。 |
| 2. Edit メニュー | 分子モデルを作るのに必要なツールがあるメニュー |
| 3. Models メニュー | 分子モデルの表示法を選択するためのメニュー |
| 4. Preferences メニュー | 色やファイルの場所など、基本設定をする部分 |
| 5. Miscellaneous メニュー | |
| 6. Utilities メニュー | 原子間距離の測定や分子全体の配向の微調整など |
| 7. Calculations メニュー | 外部プログラムを起動して計算をおこなうメニュー |
| 8. Tools メニュー | 可視化のためのツールを起動するメニュー |
| 9. About メニュー | Facio が有する機能の簡単な紹介 |

以下に各メニューの簡単な説明をしますが、詳細については使い方を含めて後述します。比較的よく使用されるメニューの項目は、**6** のように、数字の背景が塗り潰してあります。

<File メニュー>

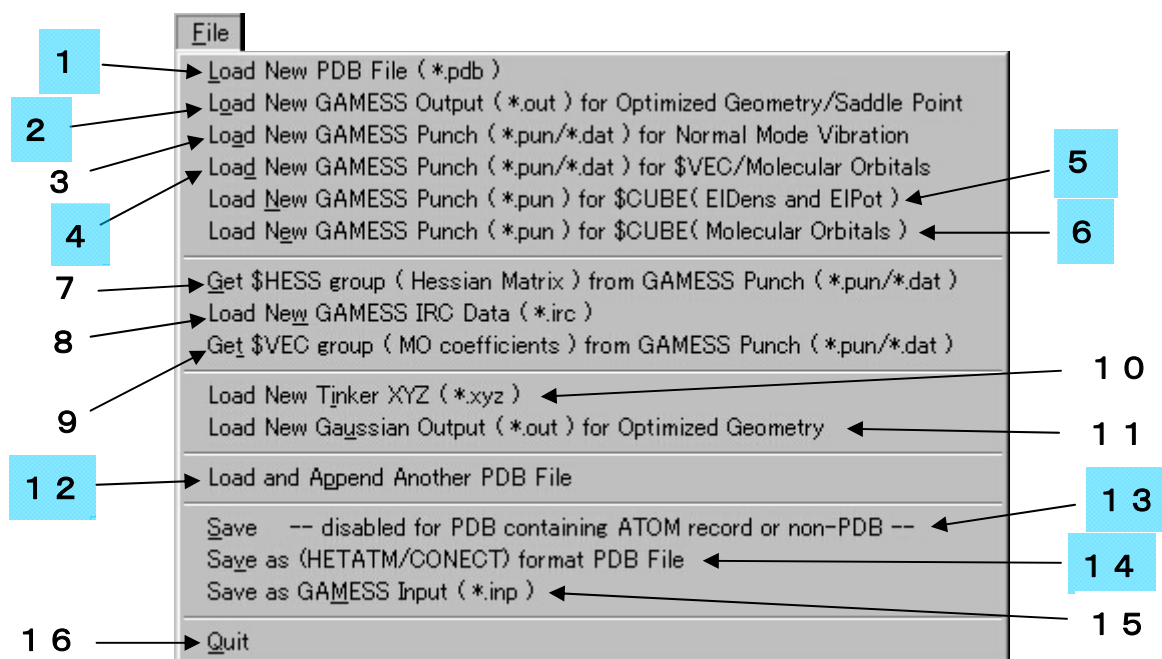


Figure 1-5

1. PDB (Protein Data Bank) 形式の分子構造データを読み込む。
2. 最適化構造もしくは遷移状態の構造を含む Gamess の出力ファイル(*.out)を読み込む。
3. 基準振動計算の結果を含む Gamess のパンチファイル(*.pun)を読み込む。
4. 分子軌道の係数 (\$VEC) データを含む Gamess のパンチファイル(*.pun)を読み込む。
(分子軌道表示のため)
5. CUBE 形式の電子密度および静電ポテンシャルデータを含む Gamess のパンチファイル(*.pun)を読み込む。
6. CUBE 形式の分子軌道のデータを含む Gamess のパンチファイル(*.pun)を読み込む。
7. Hessian 行列を Gamess のパンチファイル(*.pun)から読み込む。
8. Gamess の IRC 計算結果を含むファイル(*.irc)を読み込む。
9. 分子軌道の係数 (\$VEC) データを含む Gamess のパンチファイル(*.pun)を読み込む。
(分子軌道の係数を別の計算の入力データとして使うため)
10. Tinker の XYZ 形式の構造データを読み込む。
11. Gaussian の出力ファイル (*.out)を読み込む。
12. 新たな分子構造データを読み込み、既に表示されている分子と重ねて表示する。
13. 表示されている分子モデルを保存する。(もとの構造データが ATOM レコードを含む生体高分子の PDB である場合や PDB ファイルでない場合は、無効になっている。)
14. 表示されている分子モデルを HETATM / CONECT 形式の PDB ファイルとして保存する。
15. Gamess の入力ファイル (*.inp)として保存する。
16. Facio を終了する。

<Edit メニュー>

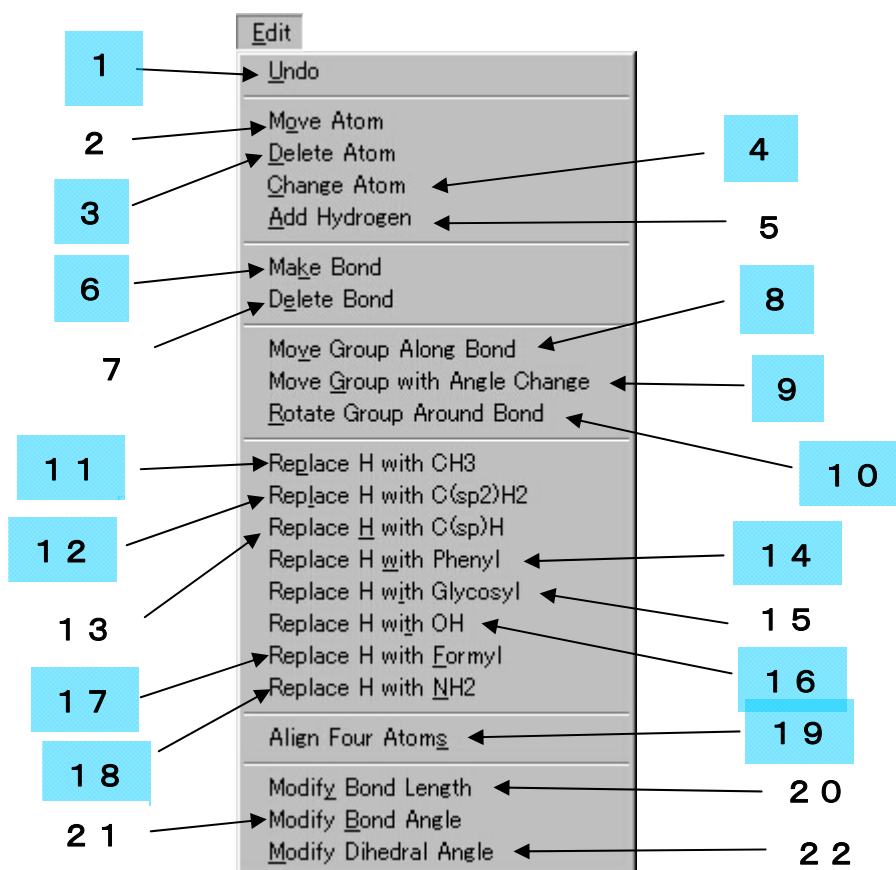


Figure 1-6

1. 分子モデルに加えた変更を1つだけ元に戻す。
2. 選択した原子をX、YもしくはZ方向に移動する。
3. 選択した原子を消去する。
4. 選択した原子の種類を変更する。
5. 選択した非水素原子に水素原子をひとつ付ける。
6. 選択した二つの原子間に結合を作る。
7. 選択した二つの原子間の結合を切る。
8. ある結合長の変化に沿って、部分構造全体を移動させる。
9. ある結合角の変化に沿って、部分構造全体を移動させる。
10. ある結合の回りに部分構造全体を回転させる。
11. 水素をメチル基で置換する。
12. 水素を（水素が二つ付いた）Sp²炭素で置換する。
13. 水素を（水素が一つ付いた）Sp炭素で置換する。
14. 水素をフェニル基で置換する。
15. 水素をグリコシル基で置換する。
16. 水素を水酸基で置換する。
17. 水素をホルミル基で置換する。
18. 水素をアミノ基で置換する。

19. 4つの原子を一直線上に並べる。(第5章を参照のこと)
20. ある結合長のみを調整する。
21. ある結合角のみを調整する。
22. ある二面角のみを調整する。

<Models メニュー>

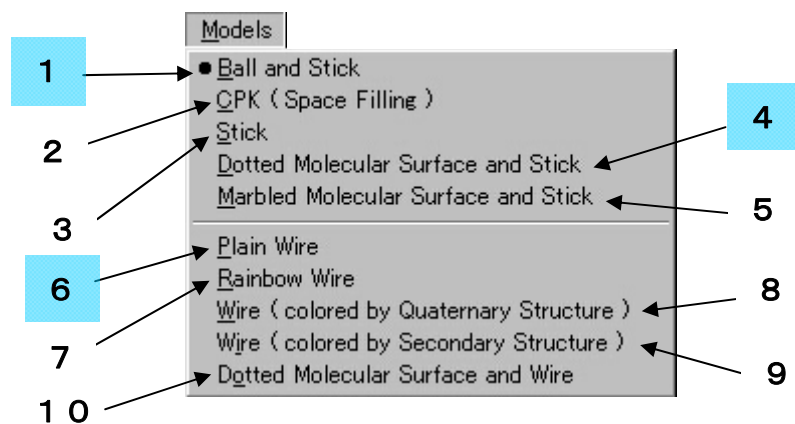


Figure 1-7

1. 玉と棒による表示
2. CPK モデルによる表示
3. 棒による表示
4. 分子表面を点描し、分子の骨格を棒で表示
5. 分子表面を小さな玉で点描し、分子の骨格を棒で表示
6. ワイヤー（線描）による表示
7. ワイヤー（線描）による表示で、描画順に7色に色分けしたもの
8. タンパク質の4次構造により色分けしたワイヤー表示
9. タンパク質の2次構造により色分けしたワイヤー表示
10. 分子表面を点描し、分子の骨格をワイヤーで表示

<Preferences メニュー>

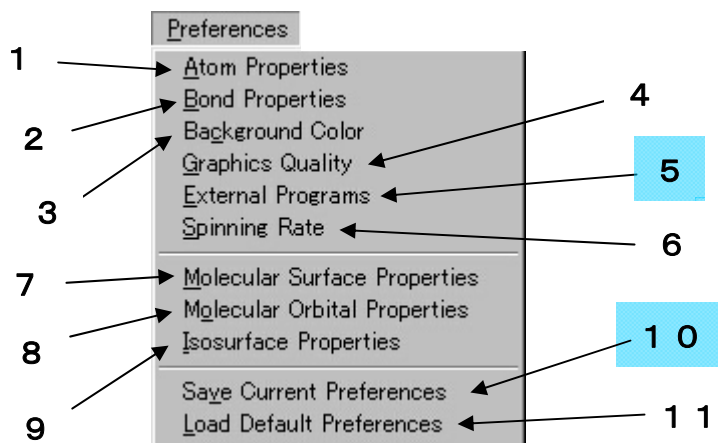


Figure 1-8

1. 原子を表す玉の色や径を設定
2. 結合を表す棒の径を設定
3. 背景の色を設定
4. グラフィックスの質を設定
5. 外部プログラムの場所等を設定
6. 分子を自動回転表示させるときの速度を設定
7. 分子表面を表す点の色を設定
8. 分子軌道のローブの色等を設定
9. 電子密度や静電ポテンシャルの等値面の色を設定
10. 現在の設定を Facio.ini に保存する
11. 設定のデフォルト値 (DefaultFacio.ini) を読み込む

<Miscellaneous メニュー>

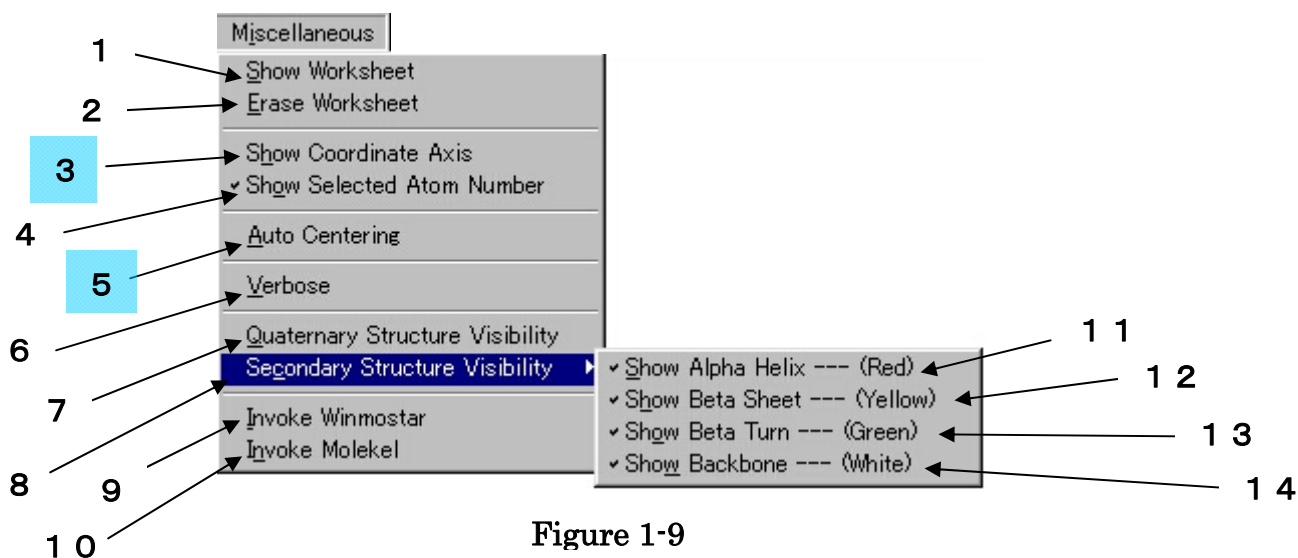


Figure 1-9

1. Worksheet (文字情報を表示する Window) を表示する。
2. Worksheet に表示されている文字情報を消去する。
3. 座標軸を表示する。
4. 選択した原子の番号を表示する。
5. 自動的に分子を中央に表示する。
6. Worksheet に表示されるメッセージをより詳しくする。
7. タンパク質の4次構造の色分け表示において、特定の部分を見えなくする。
8. タンパク質の2次構造の色分け表示において、特定の部分を見えなくする。
9. Winmostar を起動する。
10. Molekel を起動する。
11. タンパク質の2次構造で、 α ヘリックスを表示する。
12. タンパク質の2次構造で、 β シートを表示する
13. タンパク質の2次構造で、 β ターンを表示する
14. タンパク質の2次構造で、バックボーンを表示する

<Utilities メニュー>

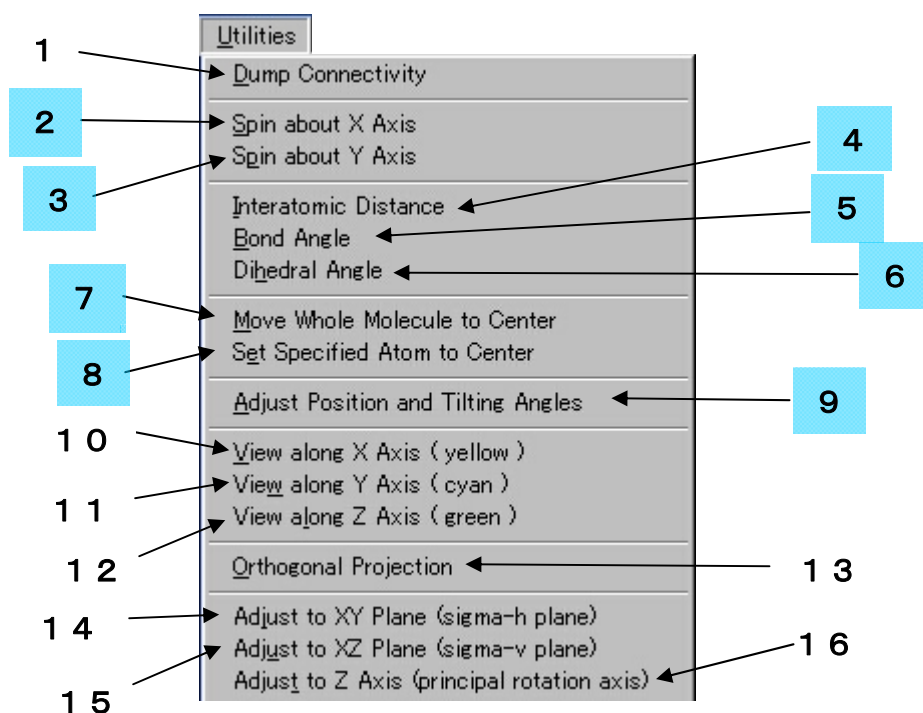


Figure 1-10

1. 分子の結合情報をファイルに保存する。
2. 分子をX軸の回りに自動回転させ表示する。
3. 分子をY軸の回りに自動回転させ表示する。
4. 選択した2つの原子について、原子間距離を表示する。
5. 選択した3つの原子について、結合角を表示する。
6. 選択した4つの原子について、二面角を表示する。
7. 分子全体を中央に移動させる。
8. 選択した特定の原子が原点にくるように分子全体を移動させる。
9. 分子全体の位置の微調整
10. X軸方向から分子を見る。
11. Y軸方向から分子を見る。
12. Z軸方向から分子を見る。
13. 分子の投影法を等角投影法にする。
14. ある決まった範囲にある原子を正確にXY平面上に移動させる。
15. ある決まった範囲にある原子を正確にXZ平面上に移動させる。
16. ある決まった範囲にある原子を正確にZ軸上に移動させる。

<Calculations メニュー>

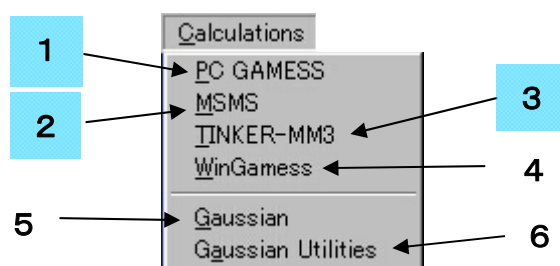


Figure 1-11

1. PC GAMESS の入力オプションの設定と起動
2. MSMS の入力オプションの設定と起動
3. TINKER-MM3 による構造最適化の起動
4. WinGamess の入力オプションの設定と起動
5. Gaussian の入力オプションの設定と起動
6. Gaussian Utilities の入力オプションの設定と起動

<Tools メニュー>

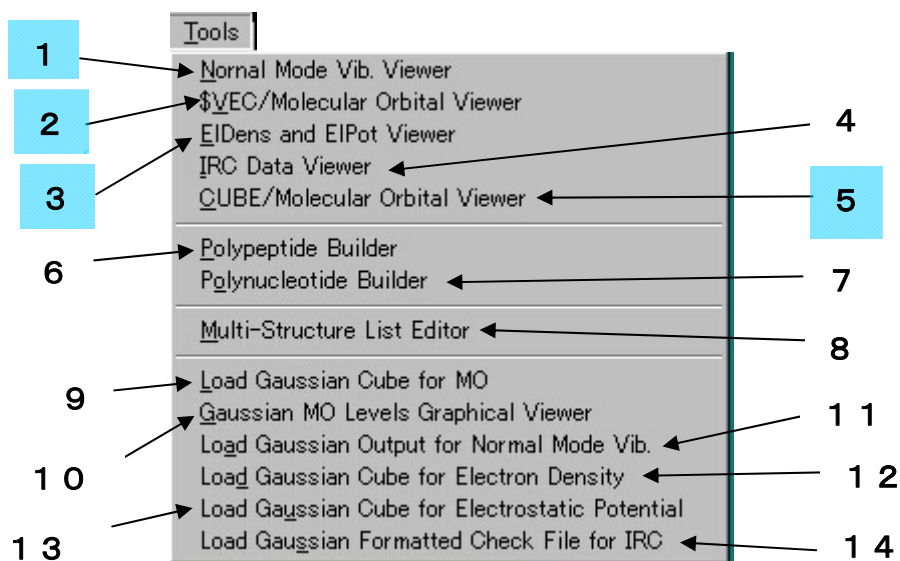


Figure 1-12

1. 基準振動のアニメ表示と赤外・ラマンスペクトルのシミュレーション
2. 分子軌道の係数をもとにした分子軌道の表示
3. 電子密度、静電ポテンシャルの表示
4. IRC データの表示
5. CUBE データによる分子軌道の表示
6. タンパク質のモデリング
7. 核酸のモデリング
8. (Facio 9.7.4 では未実装)
9. Gaussian の CUBE 形式の MO データを読み込む

- 1 0. Gaussian の分子軌道エネルギー準位を模式表示する
- 1 1. Gaussian の基準振動のデータを読み込む
- 1 2. Gaussian の電子密度の CUBE データを読み込む
- 1 3. Gaussian の静電ポテンシャルの CUBE データを読み込む
- 1 4. Gaussian の IRC データを読み込む

<About メニュー>

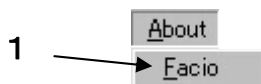


Figure 1-13

1. Facio の機能をまとめて簡単に表示する。

<Facio のダウンロード>

Facio は、自己解凍型圧縮アーカイブの形で下記の Web サイトに置いてあります。

<http://www.vector.co.jp/vpack/filearea/win/edu/science/chemical/index.html>

(Vector のダウンロードサイト カテゴリーから選ぶ>学習&教育>化学)

もしくは

<http://www1.bbq.jp/zzzfelis/Facio.html> (Facio の著者である末永のホームページ)

Facio のインストールに関しては、付録(ソフトウェアのインストール)を参照のこと。

<Facio の読み方>

プログラム名 Facio は、ラテン語の「私は作る」という動詞の *facio* (一人称単数現在形) からつけているので、その読み方もラテン語にならって、「ファキオ」としています。因みに同じ様な命名法をしているものに、*video* (ビデオ) という単語があります。これも、もとはラテン語で「私は見る」という意味です。ただし、正しいラテン語の読み方は、「ウィデオ」です。

【2】分子モデリングの概要

Facio による分子モデリングの基本的な流れは、下の図のようになります。

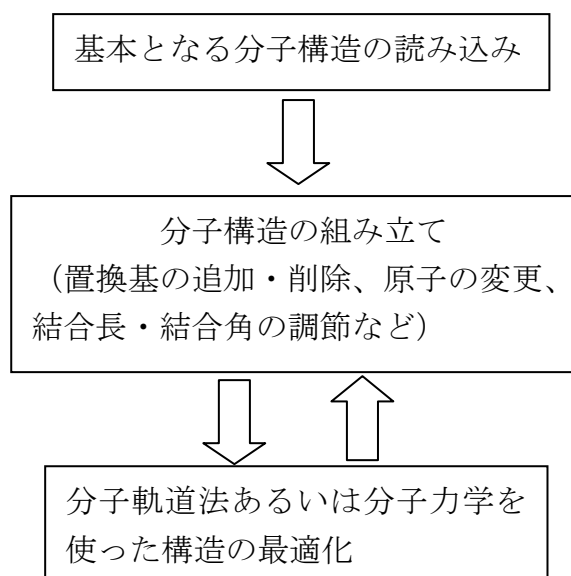


Figure 2-1

<基本となる分子構造の読み込み>

Facio を起動した状態では何も表示されていないので、まず何らかの分子を読み込む必要があります。普通は、File メニューの項目 1 を使い、PDB(Protein Data Bank)形式の構造データを読み込みます。デフォルトでは、Facio の実行ファイルがあるフォルダの PDB というフォルダにある PDB ファイルがリストとして表示されるので、この中から目的分子のモデリングに適したものを選んで下さい。自分で作ったモデルも PDB 形式で保存することができるので、モデリングの出発点として使用することができます。

この他、File メニューの項目 2 ～ 1 1、Tools メニューの項目 9、1 1 ～ 1 3 を使い、分子軌道法や分子力学計算の出力ファイルから読み込んだ構造もモデリングに使うことができます。

基本となる分子構造を読み込んだら、まず別名で保存した方が良いでしょう。変更をしたあと不用意に保存をしてしまうと、もともとなった分子の構造が変更されてしまうからです。別名での保存は、File メニューの項目 1 4 を使います。

<分子構造の組み立て>

分子構造の変更は、主として Edit メニューの機能を使って行います。使い方の基本は、メニューの項目を選択してから、原子の玉をクリックします。例えば、ある原子を消去するときには、Edit メニューの項目 3 を選択した後、消去したい原子をクリックします。メニューの項目によっては、原子を二つもしくは三つクリックする場合もあります。例えば、項目 4 では、結合を作らせようとする二つの原子をクリックしなければなりません。

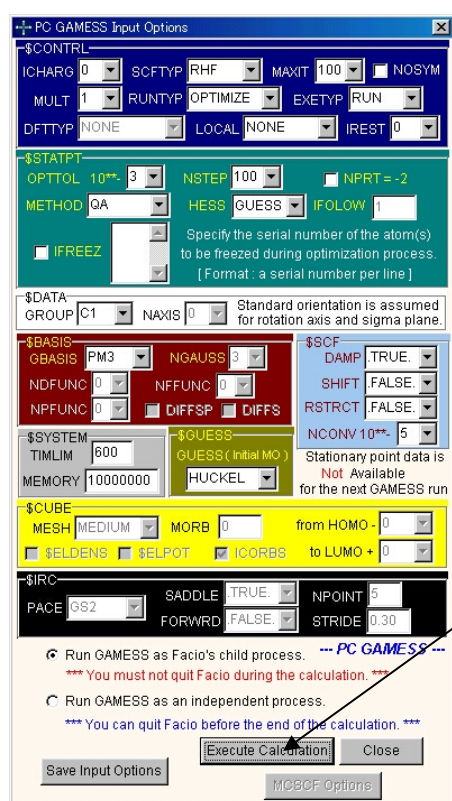
<構造の最適化>

前述のようにして、分子構造を組み立てた場合、結合長や結合角は自然な値になっておらず、構造としては少し、場合によっては非常にいびつな形になっています。そこで、分子軌道法や分子力学法を使い分子の構造をより自然な状態にすること（構造最適化）が必要になってきます。

詳しくは別の項で述べますが、モデリングと連携して分子軌道法や分子力学法を使うことは、次のように簡単にできます。

『PC GAMESS（分子軌道法）の起動』

Calculation メニューの項目 1 を選択すると、下のようなコントロールパネルが現われます。



PC GAMESS の計算オプションを設定するコントロールパネル

モデリングと連携して使用する場合には、デフォルトの設定で十分なので、特に変更しなくてもよい。

このボタンをクリックすることで、計算が始まり、計算終了後直ちに得られた安定構造が表示されます。

安定構造が表示されない場合は、初期構造や計算のオプション（例えば電荷のある構造では電荷の設定）を見直す必要があります。

Figure 2-2

『Tinker-MM3（分子力学法）の起動』

Tinker-MM3 の計算には原子タイプの設定など煩雑な作業が必要ですが、Facio が全て自動で行いますので、計算を始めるには Calculations メニューの項目 3 を選択するだけです。得られた安定構造は、計算終了後直ちに表示されます。