

分子情報表示システム MICS に関する研究

(大産大院工) ○橋爪秀幸 定久勝 芝野裕邦 高根慎也 酒井章吾

【序】本研究では分子構造・分子軌道・振動解析・化学反応の様子を Gaussian、GAMESS 等の計算化学プログラムによって計算された結果を、直感的に視覚化するためのグラフィカルユーザインターフェイスの開発を行った。単に視覚化するのではなく、本システムは分子を作成そして編集する分子モデリング機能を備えており直感的にそれらの作業を行えるようにした。

【システム設計】システムを構築するにあたって、本システムの当初の方向としてマルチプラットフォームとネットワーク環境での動作が考えられ、開発言語には Java を、また、分子構造を 3次元で表現するために OpenGL をグラフィックスライブラリとして使用した。Java から OpenGL を呼び出すための Binding システムとして GL4Java を使用している。理論上は以上の 3つが揃う環境であれば、どのようなプラットフォームでも動作可能ではある。現在は Binding システムの GL4Java の対応範囲に依存している形になっている。

次に、本研究でのグラフィックスシステムは 1つのサーバに対して複数のクライアントというようなネットワーク環境での使用を前提としている。それは、あるクライアントの発表を異なる複数のクライアントに描画することができる。これは現段階では実装していないが、変更は可能である。

最後に、本研究室のグラフィックスシステムが対応している計算化学プログラム、そして表示可能な構造（静止画、動画）については右の図 1 のような構成になっている。

Gaussian98 分子構造・分子軌道 (静止画)	GAMESS 分子構造・分子軌道 (静止画)
Intrinsic Reaction Coordinates (動画)	Dynamic Reaction Coordinates (動画)
分子振動 (動画)	分子振動 (動画)

図 1 表示可能な計算化学プログラム

【分子モデリング】今回新たに分子モデリング機能を追加した。この機能としては下の図2に示すように Z-matrix 形式で分子構造を作成し、その構造をリアルタイムに表示できるようにした。また、Gaussian および GAMESS のアウトプットファイルより座標値を取り出し編集機能を加えた。そして、作成した構造を Gaussian と GAMESS のインプットファイル形式で保存を可能にした。また、拡張機能としてマウスによって原子を3次元上で動かし編集できる機能や、マウスによって原子を構造に付け加える機能などを付け加えた。一般的な機能としての数多くのオプションを付け加え初心者にも使いやすい分子モデリング機能構築を行っている。

The screenshot shows a software window with two main panels. The left panel is a Z-matrix input table with columns for 'Atom', 'Bond', 'Angle', 'Dihedral', and 'Defining Ator'. The right panel is a 3D ball-and-stick model of a molecule with atoms colored by element (C: yellow, H: white, O: red, S: blue). A bond length of 2.4596958 ang. is highlighted. Below the model are zoom and position controls.

Atom	Bond	Angle	Dihedral	Defining Ator
S	0.0000	0.0000	0 0 0	
C	1.7977	0.0000	0.0000	1 0 0
C	1.4134	118.6136	0.0000	2 1 0
C	1.4134	122.7733	-180.0000	2 3 1
H	1.0791	118.0335	0.0000	3 2 4
H	1.0791	118.0319	0.0000	4 2 5
C	1.3641	121.8197	-180.0000	3 5 2
C	1.3641	121.8225	-180.0000	4 6 2
H	1.0892	119.8596	-0.0000	7 3 5
H	1.0893	119.8570	-0.0000	8 4 6
S	1.7075	52.8412	0.0000	7 1 9
S	1.7074	52.8427	0.0000	8 1 10

図2 Z-matrix 入力 Frame と表示 Frame

【実行結果】現在、本研究室のグラフィックスシステムは Windows2000,Me,98 そして、MacOSX, Linux(RedHat 系)などで動作確認がとれておりマルチプラットフォームとしてすべてのプラットフォームというわけではないが実現している。今回、新たに種々の機能を追加したが、分子モデリング機能意外に主に拡張された機能として分子軌道表示がある。図3にクラスター型の大きな系に対する HOMO、LUMO を示す。

このように大きな系の軌道表示をも可能にした。当日はデモンストレーションを行う予定である。

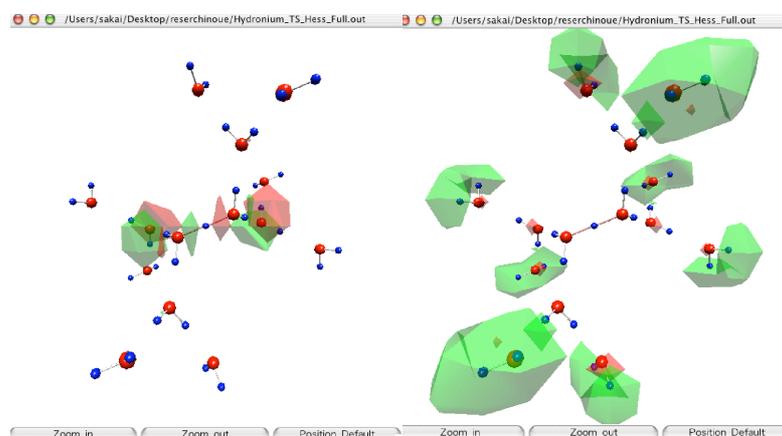


図3 分子軌道 Homo(左)、Lumo(右)の表示