

量子化学計算プログラム Gaussian および GAMESS のためのプリ・ポストプロセッサ : Facio

末永, 正彦
九州大学大学院理学研究院化学部門

<https://doi.org/10.15017/1467681>

出版情報 : 九州大学情報基盤センター広報 : 全国共同利用版. 6 (3), pp.146-165, 2007-03. Computing and Communications Center Kyushu University

バージョン :

権利関係 :

量子化学計算プログラム Gaussian および GAMESS のためのプリ・ポストプロセッサ : Facio

末永正彦 *

1. はじめに

商用の分子モデリング・可視化ソフトの価格は比較的高いため、大学で演習用としてあるまとまった数を揃えようとする場合や個人で購入しようとする場合、経済的な理由で難しいことがある。また、商用のソフトであっても操作に不合理な部分があったり、必要な機能がなかったり、グラフィックスの質がいま一つであったりもする。これらを解決するため、フリーの分子軌道法プログラムである Gaussian および GAMESS を中心にした計算化学統合環境 Facio を Delphi 6 で開発してきた。開発にあたっては、「完全にフリーなソフトウェアで尚且つ商用のソフトを越えるもの」を目標とし、これまでに OpenGL による 3D グラフィックスを使った分子モデルの表示、対話的なモデルの構築、分子軌道、静電ポテンシャルなどの可視化や基準振動のアニメーション表示を行うことのできるソフトを作ることができた。本稿では、Facio の持つ主な機能を簡単に紹介する。尚、本ソフトは、下記に示す著者のホームページより、無償でダウンロードできる。

<http://www1.bbiq.jp/zzzfelis/Facio.html>

2. 分子モデリング

Facio[1]は、分子構造ファイルのフォーマットとして PDB (Protein Data Bank) 形式を採用している。これは、核酸やタンパク質などの生体高分子のみならず通常の有機分子、遷移金属錯体などにも適用できる分子構造形式であり、他の多くのソフトウェアでもサポートされている互換性の良い形式であるためである。プログラム内部では常に PDB の HETATM/CONNECT レコードを保持・更新している。

モデリングは、「水素原子を何らかの置換基で置き換える操作」が基本になっている。このモデリング形式は、プラスチックでできた分子モデルの部品を一つ一つ組み立てていくやり方をシミュレーションしたものである。従ってモデリングを行う際はまず、PDB 形式にある分子データを何か一つ読み込むことから始まる。最初に読み込む分子としては、何でもよいが、できるだけ目的分子の構造の一部となっているものを読み込むのがよい。この目的のため、Facio の配布アーカイブには種々の分子の PDB ファイルが同梱されている。また、ユーザーが作成したモデルや Gaussian[2]や GAMESS[3]の計算によって得られた構造も PDB 形式で保存できるため、モデリングの出発点にすることができる。

置換基を付ける操作の他に、原子の消去・変更、結合の生成・削除など諸々の操作があるが、直感的に出来るものなので割愛し、ここでは Facio 独自の機能について述べる。この他、結合長、結合角などの変更による構造の修正は、手動でも行えるが、主として分子軌道法や分子力学を用いた構造最適化と連携して行うので、それに関しては後述する。

* 九州大学大学院理学研究院化学部門 E-mail: alohascc@mbbox.nc.kyushu-u.ac.jp

置換基としては、メチル基、フェニル基、水酸基、ホルミル基、アミノ基や多糖類のモデリングをするための種々のグリコシル基などが用意されており、通常は、これらの置換基の組み合わせで十分であるが、Facio では全ての構造を置換基として利用できるようにするための、他のソフトにはない独自の機能がある。それは、「既に読み込まれている分子にさらに別の分子の座標を読み込む」機能である。この機能自体は、他のモデリングソフトでも実装されている場合があるが、「**2番目に読み込んだ分子の相対的な配置を非常に細かく調整できる**」ことが大きな特徴である。これを実現するためFacio では、図1に示すような global 座標と local 座標の2つを定義している。ここで global 座標 (XYZ) は、1番目の分子の座標であり、local 座標 (xyz) は2番目の分子の座標で、2番目の分子の読み込み直後は、2つの座標系は一致している。2番目の分子の平行移動は global 座標に沿って行われ、回転は local 座標に対して行われる。これにより、2番目の分子の相対的な配向の微調整が可能となる。この機能は、例えば Diels-Alder 反応の初期構造の作成のように二つの成分の相対位置を微調整したり、遷移金属錯体の配位子を金属のまわりに配置しながらモデリングを行うなどの場合に威力を発揮する。

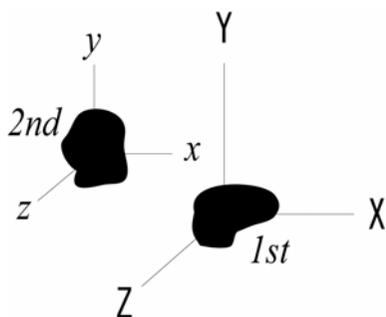


図1. global 座標 (XYZ) 上にある1番目の分子と平行移動を行った後の local 座標 (xyz) 上にある2番目の分子

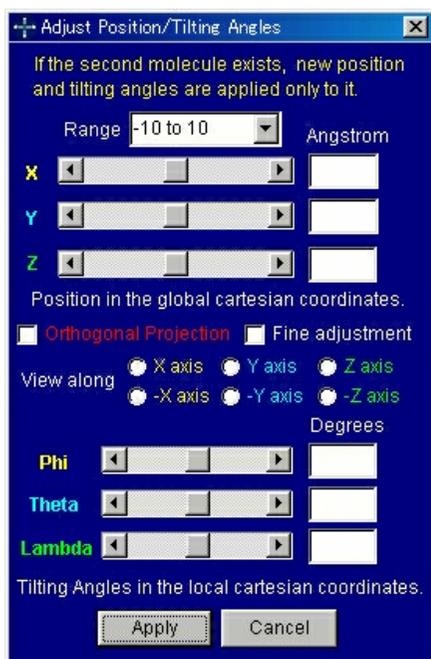


図2. 相対位置を微調整するためのパネル

2番目に読み込んだ分子の相対位置は、図2に示すようなパネルで調整する。平行移動量と回転量を決めるスライダーの他に、分子の視点を X, -X, Y, -Y, Z, -Z に換えるラジオボタンがあるため、視点を絶えず変えながらの相対位置調整が容易である。

この調整機能は、2番目の分子がない場合でも使うことができる。その場合には、例えば特定の原子をある座標軸に置いたり、ある軸に対して回転させたりするなど、読み込んだ分子の座標の変換が自由にできる。この機能は、例えば、ある結合がZ軸上になるような方向に分子を配向させるような操作を容易にする。

「既に取り込まれている分子にさらに別の分子の座標を読み込む」機能に加えて、「四つの原子を一直線上に並べる」機能を使うと、2つの分子の間に結合を作らせることが容易になる。これは、1番目の分子の任意の2つの原子と2番目の分子の任意の2つの原子を直線上に並べる機能である。具体的には、図3に示すような移動である。

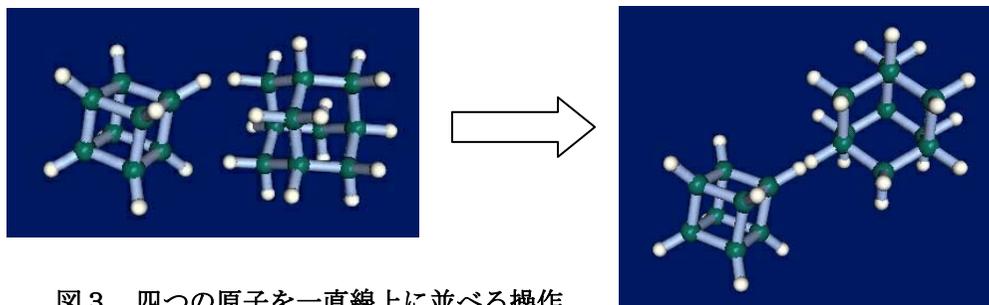


図3. 四つの原子を一直線上に並べる操作

並んだ4個の原子のうち、内側の2つの水素を除去し、外側の2つの炭素の間に結合を作らせ、更に結合長の調整とともに結合の両端にあるグループを結合に沿って移動させると、結果として2つの分子が結合できることになる。このことは、「**Facio** では全てのPDB形式の構造を置換基として利用することができる」ということを意味する。これにより、非常に大きくて複雑な分子のモデルを作る際、小さなブロックに分け、それぞれを構造最適化した後、繋げていくというブロックモデリングを行うことが可能である。

原子の消去・変更、結合の生成・削除などモデリングに必要な普通の機能についての説明は割愛し、ここでは複雑な分子のモデルを構築するためにFacio独自に実装された機能について説明したが、最後にFacioのモデリング能力を3つの例で示す。図4、図5、図6に示す分子モデルは、Facioを使いゼロから作成したもので、配布アーカイブにも同梱されている。

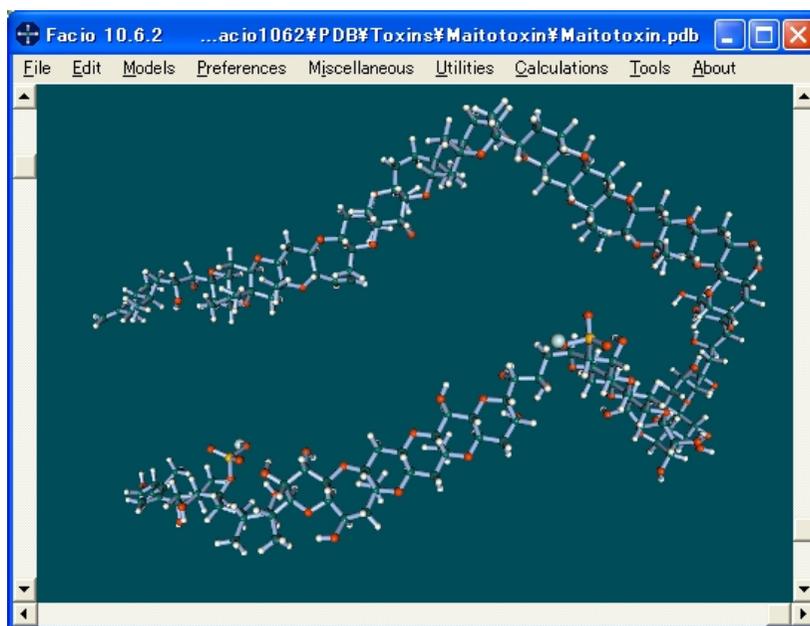


図4. 海産毒マイトトキシンの分子モデル

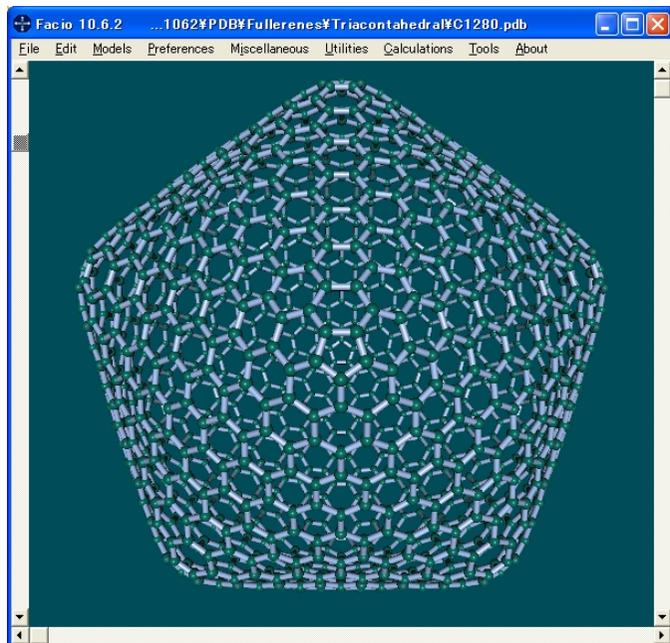


図 5. 高次フラーレン C_{1280} の分子モデル

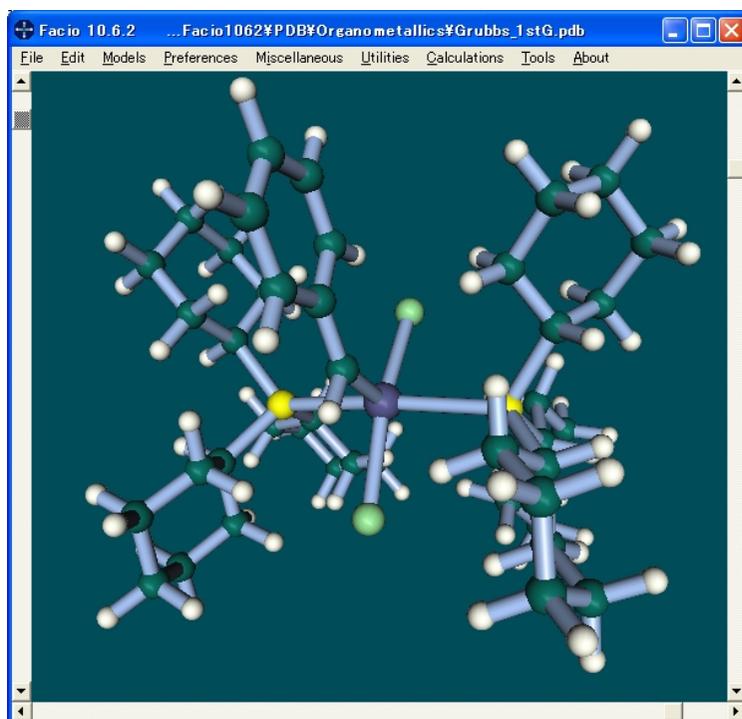


図 6. Grubbs 第一世代触媒の分子モデル

3. 入力ファイルの作成と計算の開始

3. 1 GAMESS

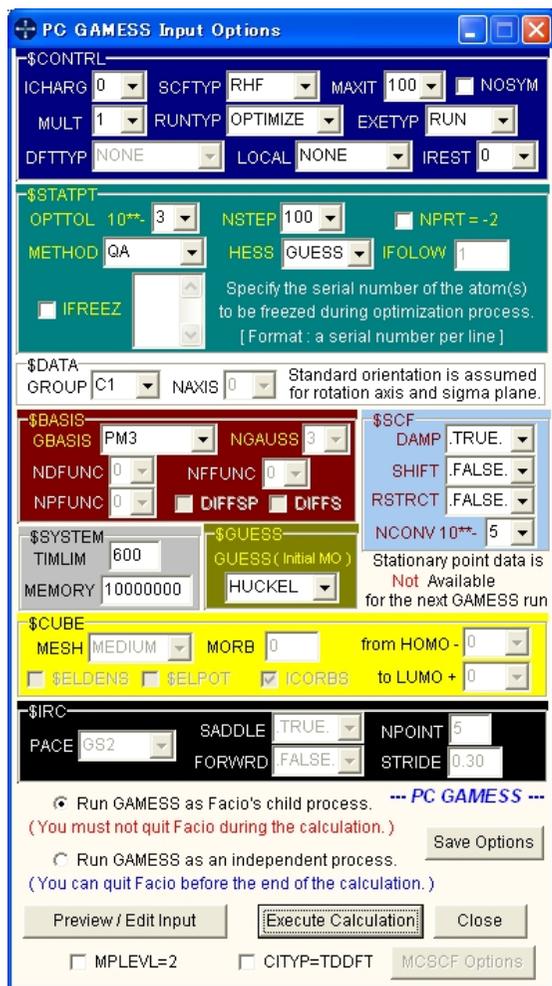


図7. PC GAMESS の入力オプションを設定するための GUI

計算によっては、PUNCH ファイルから切り出した \$VEC グループや \$HESS グループデータを入力ファイルに貼り付けることがあるが、分子が大きくなると、これらのデータは巨大になるため手動での作業は難しくなる。Facio は、この切り出し作業を自動化している。

Facio では GAMESS の起動に関して 2つのモードを用意している。一つは、GAMESS を Facio の子プロセスとして起動するモードで、もう一つは GAMESS を独立なプロセスとして起動するモードである。前者では、計算終了をモニターしているため、最適化された構造を表示されているモデルに直ちに反映させることができる。従って、分子モデリングを GAMESS の構造最適化機能と密に連携して行う場合は、主として、このモードで行う。ただし、計算中は Facio を終了させることができない。これに対して時間のかかる大きな計算の場合には、独立なプロセスとして起動するモードを使用する。このモードでは、計算中でも Facio の終了が可能であり、使用しているリソースを開放することができる。

GAMESS の入力オプションの設定は、図7に示すような GUI を介して行う。各制御コマンドグループ (\$CONTRL や \$BASIS など) は、背景の色をかえまとめて配置されており、各グループの入力パラメータは使用頻度の高いと思われるものが選んである。相互依存のあるパラメータの組は、できるだけ適切なものが選択されるようにしてある。

計算の種類としては、構造最適化、一点エネルギー計算、遷移状態の最適化、Hessian 計算、ラマン強度の計算、IRC 計算の起動をサポートしている。PC GAMESS (Ver. 4.3) 以降の機能である B3LYP などの DFT 計算や分子軌道のグリッドデータである \$CUBE データの生成もサポートしている。\$CUBE に関して、PC GAMESS のオリジナルな仕様では分子軌道の番号を入力ファイルに入れることになっているが、これでは使い勝手が悪いので HOMO と LUMO からの相対的な軌道の準位を指定するだけで良いように GUI を作成した。

計算の開始は、このパネルにあるボタンをクリックすることでできる。

図7は、PC GAMESS 用の GUI であるが、Windows 上のもう一つの GAMESS である WinGamess 用には別の GUI を用意している。

3. 2 Gaussian

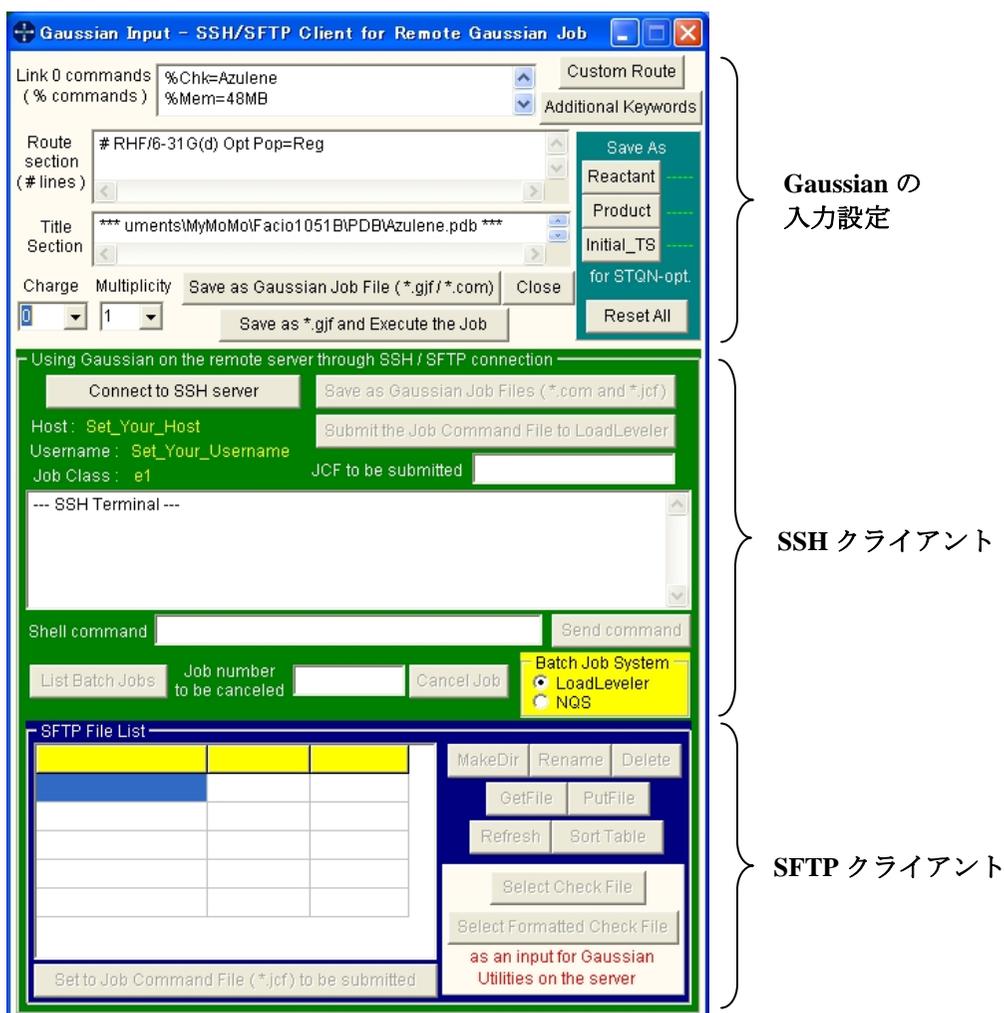


図 8. Gaussian の入力設定および SSH、SFTP クライアントの GUI

Gaussian 用の入力設定パネルは、図 8 のように SSH クライアント、SFTP クライアントの GUI がいっしょになっている。これは、図 9 に示すような、ネットワークを介した Gaussian ジョブの送信や、リモートマシンにあるバッチジョブシステムを利用したジョブの起動やその結果の受け取りを円滑に行うためである。

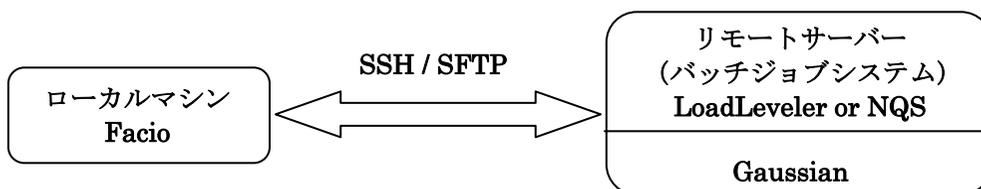


図 9. SSH / SFTP 接続によるリモートサーバー上の Gaussian の利用

Gaussian の入力設定は、GAMESS に比べて短いので、ルートセクションの文字列を直接書き込んで行う仕様とした。予め設定してあるカスタムルートセクション（ユーザーによる編集が可能）のリストから選んで設定することもできる。

この他、Opt=QST2、QST3 計算に必要な反応物、生成物、遷移状態の初期座標を保存するためのボタンを用意し、遷移状態計算の入力をサポートしたり、Mult-Step ジョブの入力ファイルの作成をサポートする機能もある。

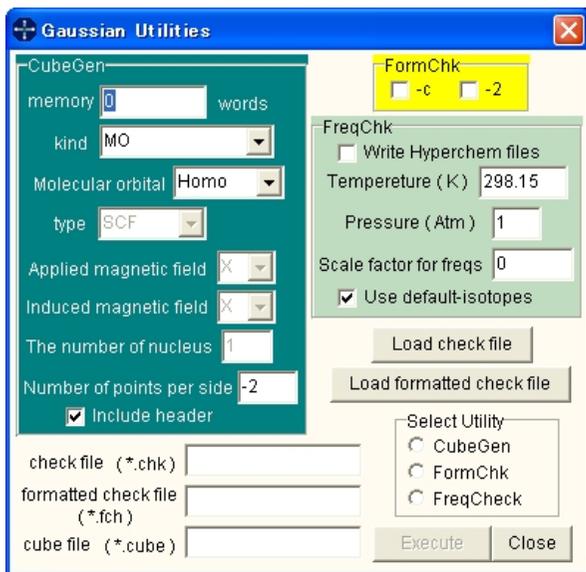


図 1 0. Gaussian Utilities のための GUI

Gaussian Utilities は、チェックポイントファイルから Formatted チェックポイントファイルを作成したり、Cube 形式の分子軌道や電子密度のデータを作成するためのプログラムであり、コマンドラインから使用するが、引数の設定など間違いやすいところがあるので、図 1 0 に示すような GUI を作成した。

Facio が可視化する分子軌道は、Gaussian Utilities の CubeGen により作成した Cube 形式の分子軌道データである。

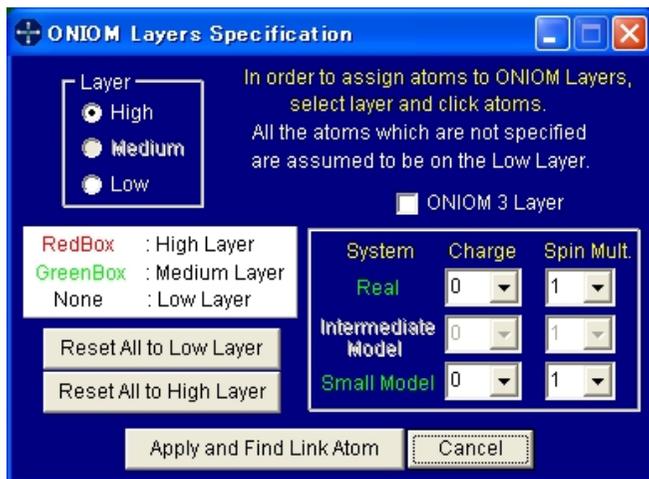


図 1 1. ONIOM レイヤー設定のための GUI

図 1 1 は、ONIOM レイヤーを設定するための GUI で、3 レイヤーに対応している。設定しようとするレイヤーを選択し、分子モデル中の原子をクリックすることにより、原子の玉を取り囲むような立方体骨格でマーカーが付けられる。ここでの設定内容をもとに、Link Atom が自動的に判別され、入力ファイルが作成される。

4. 計算結果の可視化

4. 1 分子軌道

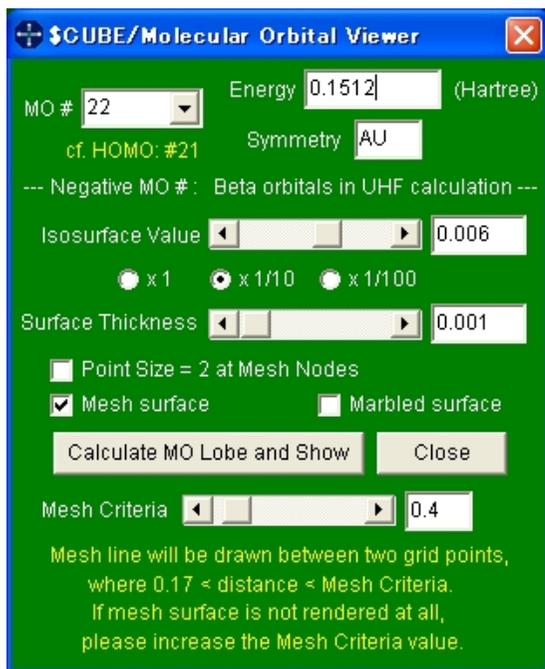


図 1 2. Cube MO の表示を制御するパネル

GAMESS では、PUNCH ファイルの \$VEC (半経験的 MO の場合は、こちらを使う) もしくは、\$CUBE を可視化し、Gaussian では、Gaussian Utilities の CubeGen で作成した Cube データを可視化する。データを読み込むメニューは、それぞれ別のものが用意してあるが、Cube データの可視化のコントロールパネルは、図 1 2 のようなものであり GAMESS と Gaussian で共通である。\$VEC 用のパネルは、同様のものであるため、ここでは省略する。

表示しようとする MO の番号、分子軌道の等値表面の値の絶対値、表面の「厚み」を設定し、分子軌道のローブを描画させると、図 1 3 のような図が表示される。分子を回転させると、分子軌道の立体的な形を見ることができる。

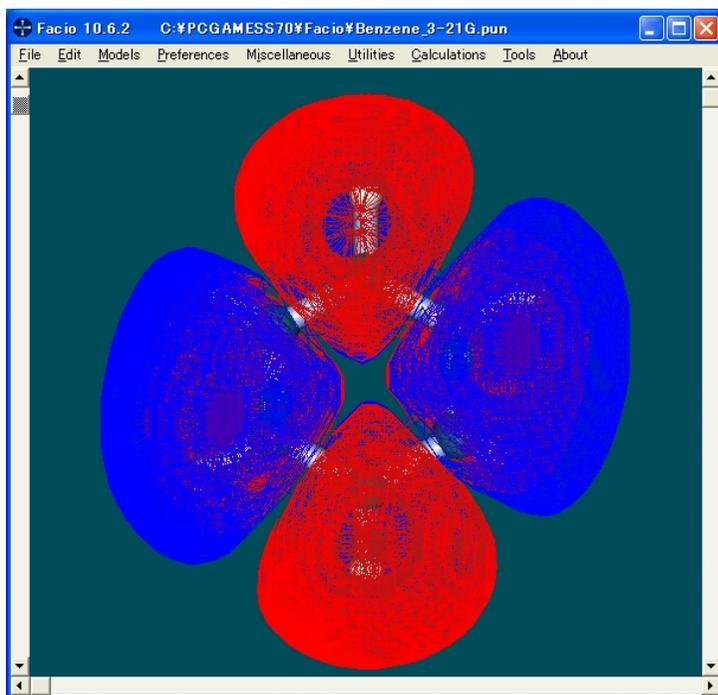
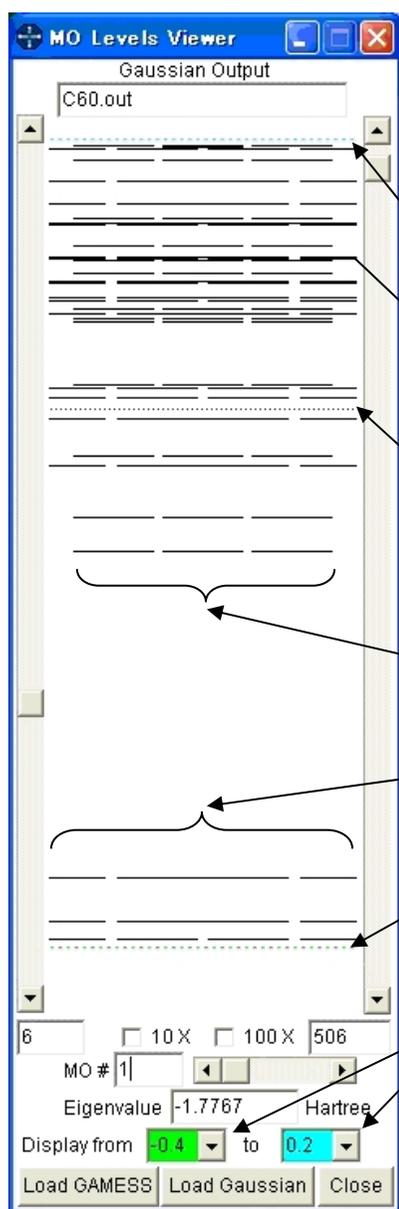


図 1 3. ベンゼンの LUMO

4. 2 MO準位の模式的表示



GAMESS または Gaussian の出力ファイルを読み込み、分子軌道のエネルギー準位を図 1 4 に示すような模式図であらわすことができる。軌道の縮重度も表現できる。

表示するエネルギー範囲が設定できるため、エネルギー準位が非常に込み合った領域でも、その様子をはっきりみることができる。

表示するエネルギー範囲の上限
(水色の破線)

この部分を拡大したものが図 1 5

エネルギーゼロの準位
(黒色の破線)

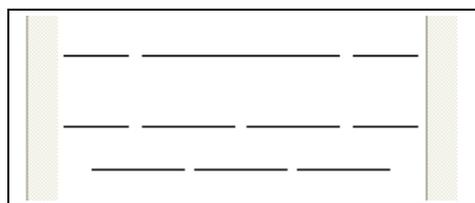
三重に縮重した C₆₀ の LUMO

五重に縮重した C₆₀ の HOMO

表示するエネルギー範囲の下限
(黄緑色の破線)

エネルギー範囲を設定するためのボタン

図 1 4. C₆₀ の分子軌道のエネルギー準位



エネルギーが非常に接近しているため縮重の様子がわからなかった準位も、表示するエネルギー範囲を適当に設定することにより、図 1 5 のようにはっきりと分離して表示することができる。

図 1 5. エネルギー準位の部分拡大図

4. 3 電子密度と静電ポテンシャル

Facio では、PC GAMESS および Gaussian が出力する Cube 形式の電子密度と静電ポテンシャルを可視化する。図 1 6 に表示条件を設定するためのパネルを示し、図 1 7 に電子密度の等値表面の例を示す。静電ポテンシャルも電子密度と同じ等値表面の可視化が可能であるが、ここでは、図 1 8 に示すような「溶媒排除表面上における静電ポテンシャルの色分け表示」を紹介する。溶媒排除表面を求める MSMS という外部プログラムとの連携は、後述する。(5. 3を参照のこと)

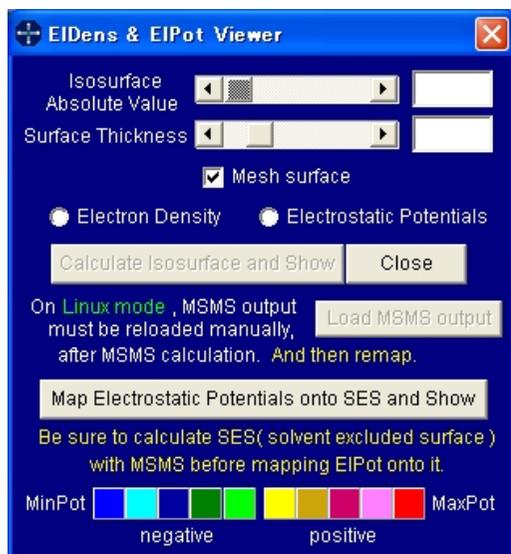


図 1 6. 電子密度・静電ポテンシャル用パネル

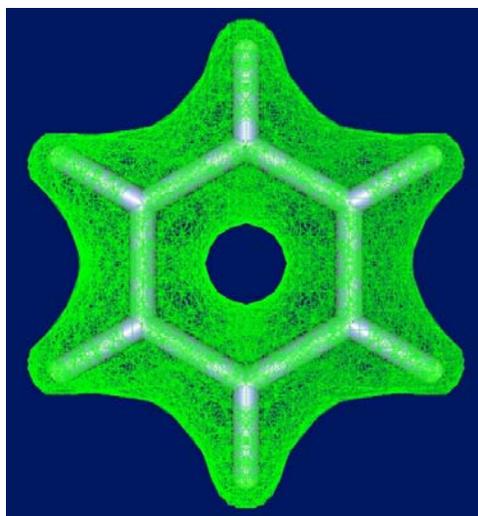


図 1 7. 電子密度等値表面

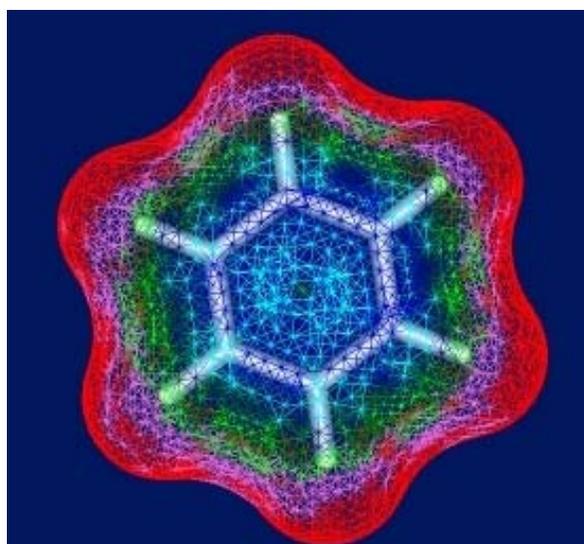


図 1 8. 溶媒排除表面上における静電ポテンシャルの色分け表示

4. 4 基準振動のアニメーションと赤外、ラマン、振動円二色性 (VCD) スペクトルのシミュレーション

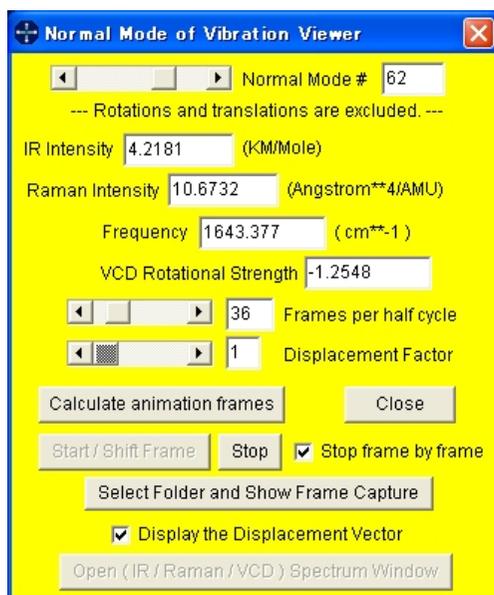


図 1 9. 基準振動の表示設定用パネル

GAMESS の PUNCH ファイルおよび Gaussian の output ファイルにある基準振動の変位ベクトルデータを読み込み、図 1 9 のようなパネルでアニメーションの 1 サイクル当たりのフレーム数や変位ベクトルの大きさを調節し、基準振動を非常に高速で滑らかなアニメーションで表示する。(図 2 0) また、フレーム毎に動きを止めるモードもあり、それぞれのフレームを通し番号付きの画像ファイルとして連続的に保存する機能もある。

この他、赤外強度、ラマン強度、VCD 強度と振動数のデータからそれぞれのスペクトルをシミュレーションすることができる。(図 2 1)

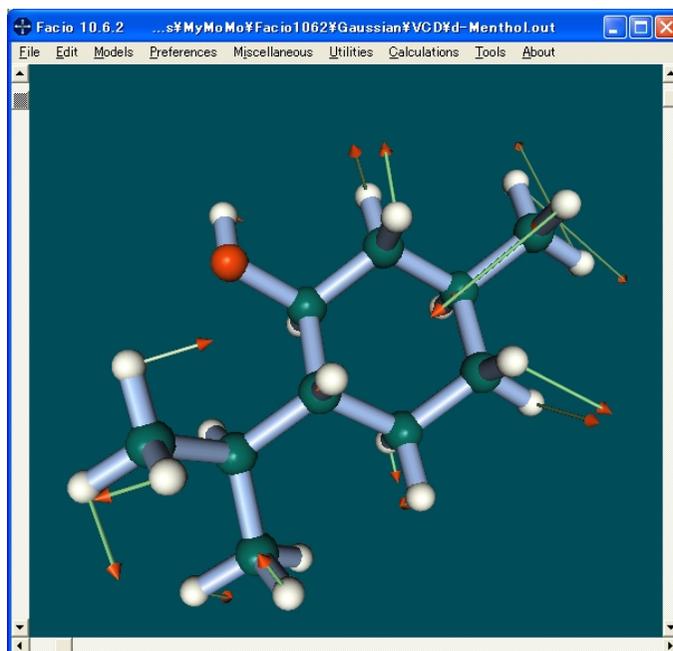


図 2 0. 矢による基準振動ベクトル (*d*-メントール 基準振動 #62)
(基準ベクトルに沿って原子が動くアニメーションとして表示できる)

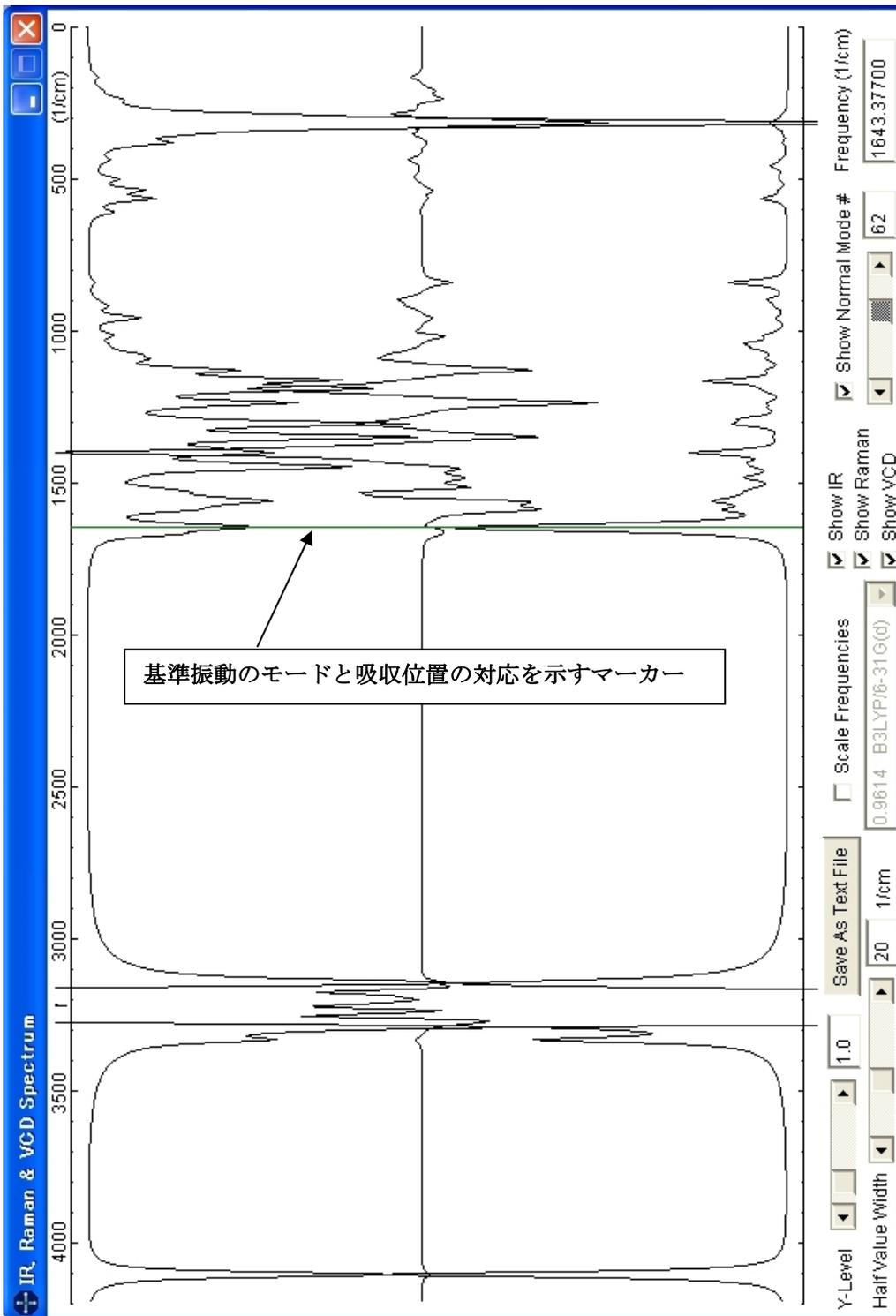


図 2 1. *d*-メントールの IR (上段), VCD (中段), Raman (下段) スペクトルのシミュレーション

4. 5 IRC 計算および MD 計算の Trajectory

GAMESS の PUNCH ファイルおよび Gaussian の Formatted Check ファイルから IRC 計算の結果を読み込み、その構造変化をアニメーションで表示することができる。IRC 各点でのエネルギー値の表示や動きの制御は、図 2 2 のパネルで行なう。

また、Gaussian の分子動力学計算より得られる Trajectory に沿った構造変化をアニメーションで表示することができる。図 2 3 は Trajectory 各点でのエネルギー値の表示や動きの制御を行なうパネルである。核運動、電子運動、ポテンシャルおよび全エネルギーの変化は、図 2 4 のようなグラフとして表示される。

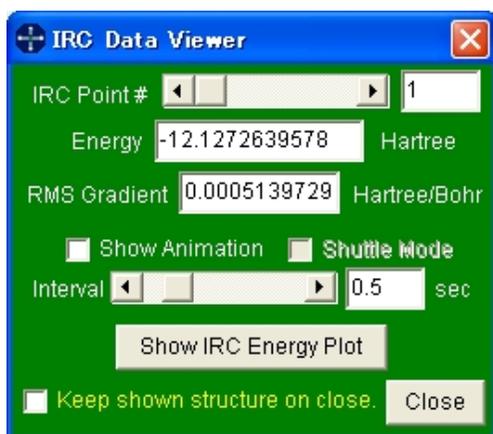


図 2 2. IRC 計算の表示用パネル

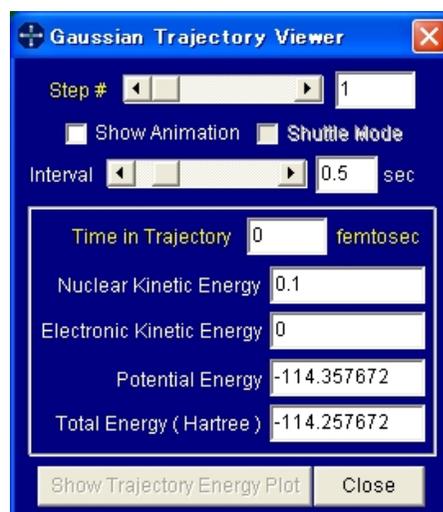


図 2 3. MD 計算の Trajectory 表示用パネル

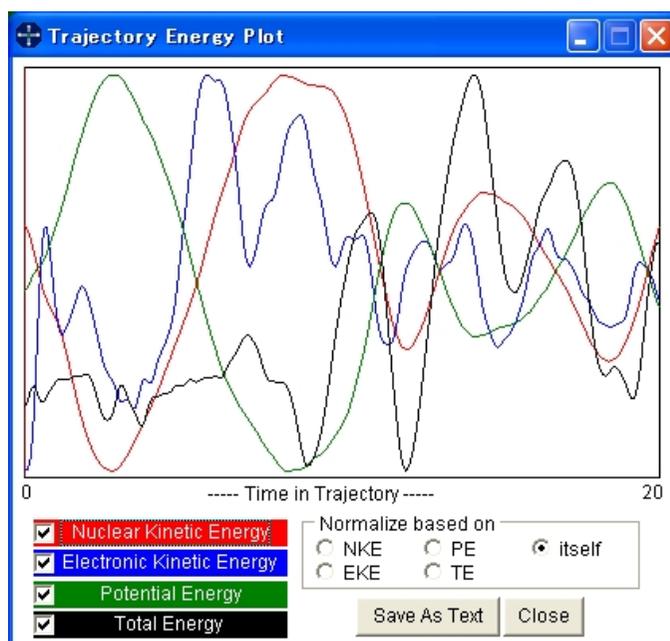


図 2 4. Trajectory に沿った核運動、電子運動、ポテンシャルおよび全エネルギーの変化

5. その他の機能

5. 1 分子力学プログラム TINKER との連携

Facio は、TINKER[4]の MM3 力場パラメータを使った分子力学計算と連携し、分子モデリングを容易にする機能がある。図 5 に示した高次フラウンゲン C₁₂₈₀ の分子モデルは、TINKER を駆使して作成した。分子力学計算に必要な入力ファイルの作成には、各原子に対して MM3 力場で定義されている原子タイプを判別する必要であるが、この作業は Facio により自動化されているため、ユーザーは何も考えなくてよい。TINKER により最適化された構造は、計算終了後直ちにメイン画面に表示されている分子モデルに反映されるため、TINKER との連携は非常に円滑に行われる。

この他、TINKER が有するポリペプチド、核酸のモデリングプログラム (protein.exe と nucleic.exe) に対するインターフェイスも完備している。(図 2 5、図 2 6)

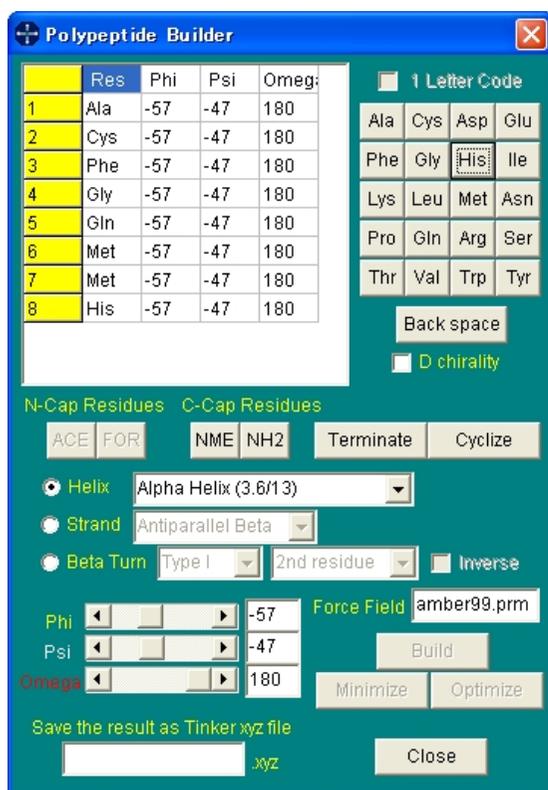


図 2 5. TINKER の protein.exe に対する GUI

アミノ酸残基もしくはヌクレオチドの並び方を指定することにより、ポリペプチド、ポリヌクレオチドのモデリングが簡単に行える。また、ポリペプチドのモデリングでは、ヘリックスやベータ構造の種類を指定するだけで適切な Phi, Psi, Omega の値を自動的に設定するなど Facio 独自の機能もある。さらに、組み上がったモデルに対して TINKER の amber 力場を用いた構造最適化を行うこともできる。

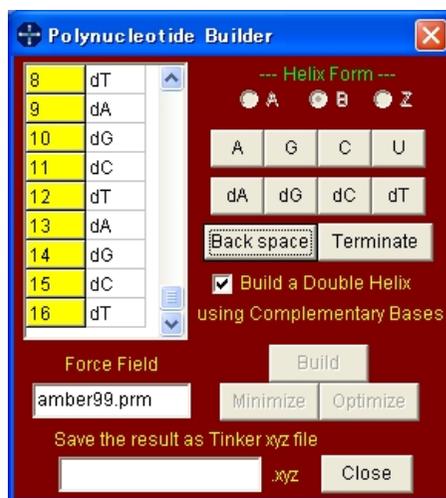


図 2 6. TINKER の nucleic.exe に対する GUI

図 2 7 と図 2 8 に TINKER を使ったポリペプチドと DNA のモデリングの例を示す。

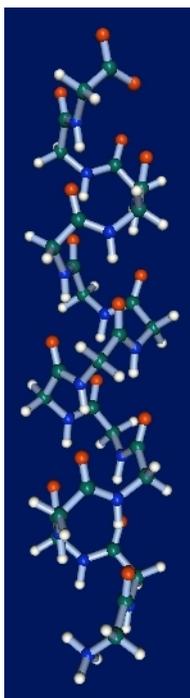


図 2 7. α - ヘリックス構造のグリシン 1 5 量体のモデル

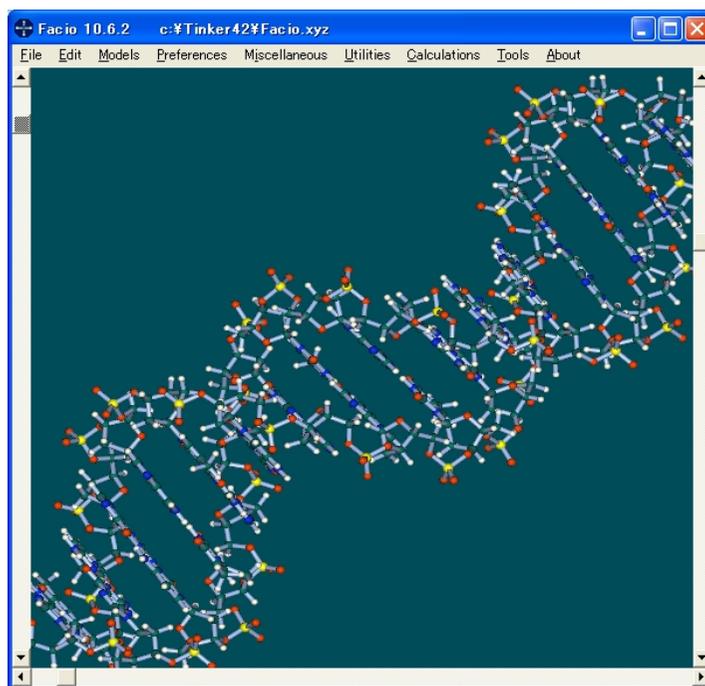


図 2 8. B 型ヘリックス構造の DNA のモデル

5. 2 水素原子の補完

X線結晶構造で求められたタンパク質など生体高分子の PDB ファイルでは、水素原子がほとんど欠落しているものが多い。これらの分子の分子軌道計算を行うためには、欠落している水素原子を補完してやる必要があるが、Facio はこれを自動的に行う。(図 2 9)

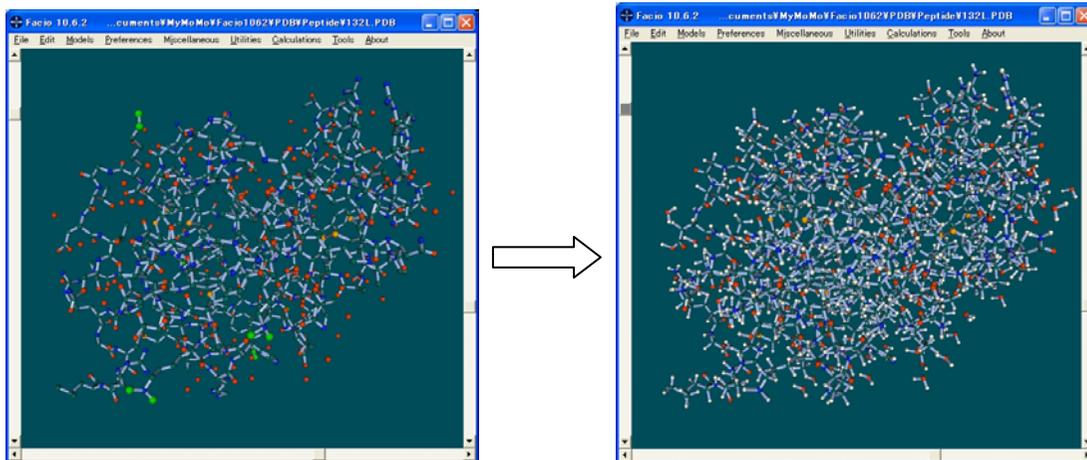


図 2 9. タンパク質 (123L.pdb) の水素補完

5. 3 溶媒排除表面の計算

Facio は、MSMS[5]というソフトウェアと連携して溶媒排除表面を求めることができる。図30は、MSMSのコントロールパネルであり、表面を表現する点の密度と表面を求めるためのプローブ球の半径を指定する。MSMSの入力ファイル作成や計算結果の読み込み、可視化はFacioにより自動化されているので、スタートボタンをクリックし、分子モデルの表示法をDotted Molecular Surface and Stickに変更するだけでよい。

図31は、 β -シクロデキストリンの溶媒排除表面を点描で表現したものである。これを見ると分子内にある空洞の大きさが良く分かる。

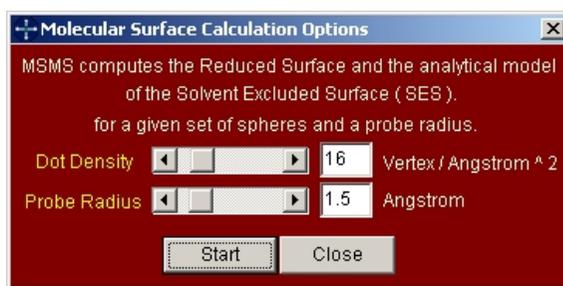


図30. MSMSコントロールパネル

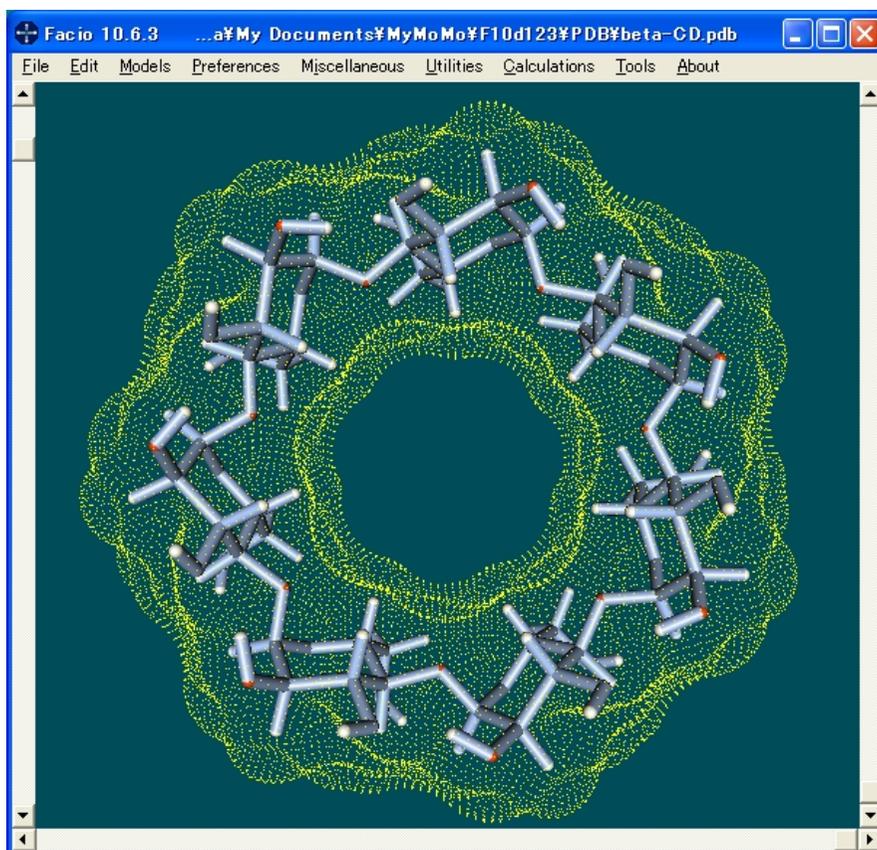


図31. β -シクロデキストリンの溶媒排除表面

4. 3の静電ポテンシャルの項に出てきた図18は、このMSMSで求めた溶媒排除表面上での静電ポテンシャルの値を色で表現したものである。

5. 4 gnuplot と連携した分子軌道の等高線表示

PC GAMESS と Gaussian の Cube 形式の MO を表示した状態で、任意の断面を設定することにより gnuplot[6] と連携して、その断面内の MO を等高線表示し、PostScript ファイルとして保存する。描画に必要な gnuplot のコマンドファイルの作成は Facio が自動的に行うので、ユーザーは、断面の位置、傾き、一辺の長さを設定し、必要があれば gnuplot のオプションを図 3 2 のパネルから設定するだけでよい。

等高線図が保存される時、同時にその断面上に投影された分子の骨格が保存される。

図 3 3 は、二つの PostScript ファイル (等高線図と骨格の投影図) を一旦 PDF に変換したのち Illustrator で合成した図である。

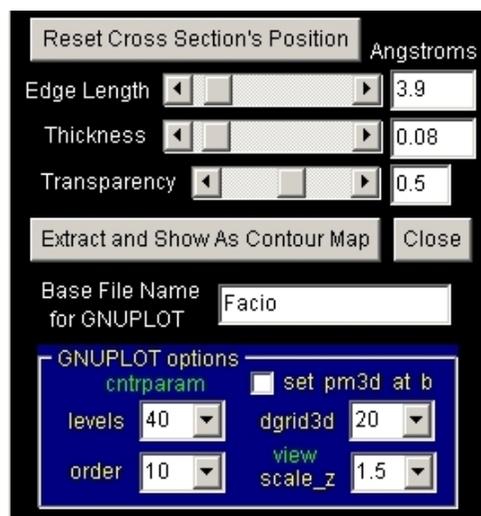


図 3 2. MO 断面と gnuplot の設定パネルの一部

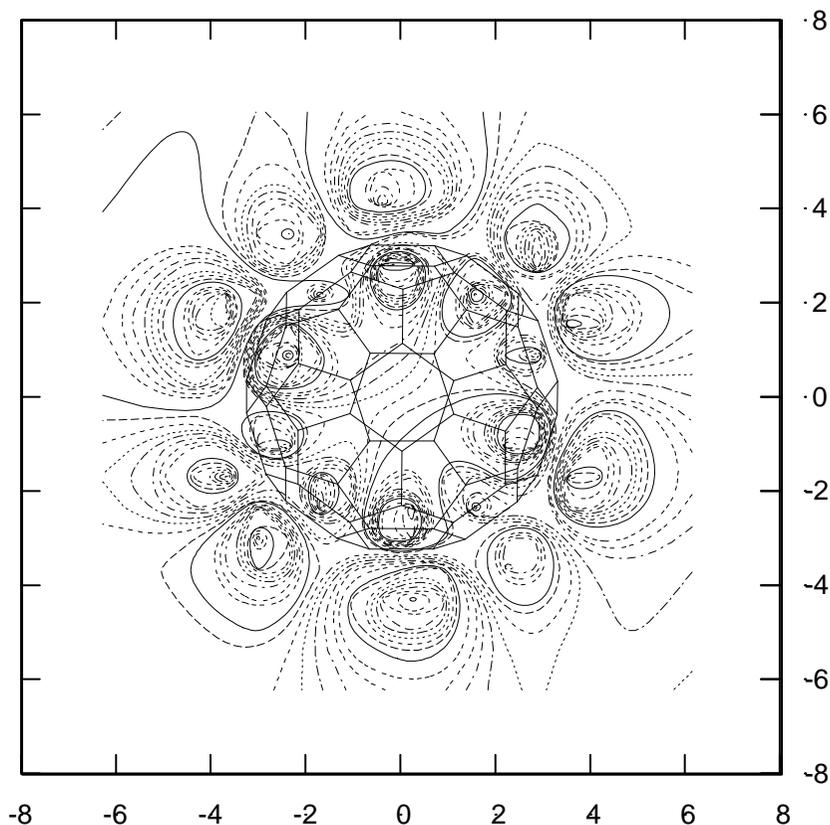


図 3 3. C₆₀ の LUMO の断面の等高線表示

5. 5 Linux 対応

Windows のアプリケーションを Linux 上で動かすためのソフトウェアである WINE[7] と OpenGL 互換のグラフィックスライブラリである Mesa[8] を使うことで、Facio を Linux の環境で動かすことが可能である。GAMESS, TINKER, MSMS といった外部プログラムとの連携も Windows の場合と同様に行うことができる。これまでにテストした Linux のディストリビューションは、Fedora Core 4 と Scientific Linux である。

Linux に対応したことで、UTChem[9] の入力ファイルを作成するための GUI (図 3 4) を実装した。Facio から計算を開始させることができる。UTChem とは、東京大学の平尾研究室で開発されている分子理論計算プログラムパッケージである。

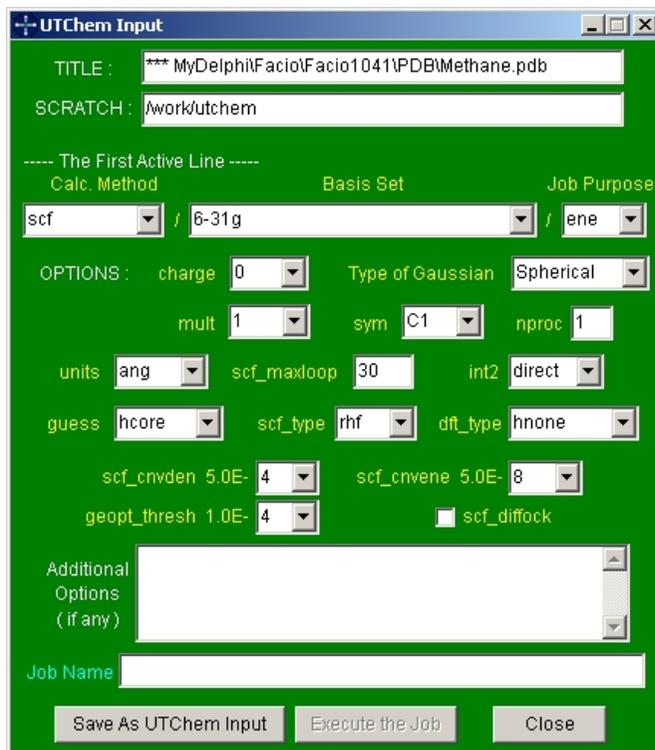


図 3 4. UTChem の入力ファイルを作成するための GUI

6. おわりに

本稿では、Gaussian および GAMESS を使う上で必要な Facio の分子モデリング、入力ファイル作成および可視化機能について概観してきた。Gaussian のプリ・ポストプロセッサとしての機能は、商用のソフトウェアである GaussView や MolStudio[10] (九大内では自由に使用可) と比較してもそれほど遜色は無いのではないかとと思われる。また GAMESS は、フリーの量子化学計算プログラムであるので、Facio との組み合わせは、計算化学に興味があり試しにやってみようという学生さんに対し完全にフリーな計算化学の環境を提供することになる。Facio は、配布アーカイブを解凍するだけで、中にある天然物や有機金属錯体など多くの種類の分子モデルを見ることができ、Gaussian や Gaussian のサンプル出力を可視化してみることができるので、気軽に試して頂ければ幸いである。

謝辞

Gaussian用のGUI(図8)にSSH/SFTPクライアントを組み込み、ネットワークを通して計算の依頼や結果の取得ができるような環境を開発したが、その際、下記の研究課題で情報基盤センターのマシンおよびGaussianを使わせて頂いた。ここに感謝致します。

九州大学情報基盤センター・平成17年度プログラムライブラリ開発
研究課題：「計算化学統合環境FacioのGaussianに対するインターフェイスの整備(NQS
対応および可視化機能の強化)」

参考文献

[1] Facio

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

本稿は、上記の論文の内容にその後実装した機能の紹介を加筆したものである。
<http://www1.bbiq.jp/zzzfelis/Facio.html>

[2] Gaussian and GaussView

Gaussian 03, Revision C.02, M. J. Frisch, G. W. Trucks, H. B. Schlegel, G. E. Scuseria, M. A. Robb, J. R. Cheeseman, J. A. Montgomery, Jr., T. Vreven, K. N. Kudin, J. C. Burant, J. M. Millam, S. S. Iyengar, J. Tomasi, V. Barone, B. Mennucci, M. Cossi, G. Scalmani, N. Rega, G. A. Petersson, H. Nakatsuji, M. Hada, M. Ehara, K. Toyota, R. Fukuda, J. Hasegawa, M. Ishida, T. Nakajima, Y. Honda, O. Kitao, H. Nakai, M. Klene, X. Li, J. E. Knox, H. P. Hratchian, J. B. Cross, V. Bakken, C. Adamo, J. Jaramillo, R. Gomperts, R. E. Stratmann, O. Yazyev, A. J. Austin, R. Cammi, C. Pomelli, J. W. Ochterski, P. Y. Ayala, K. Morokuma, G. A. Voth, P. Salvador, J. J. Dannenberg, V. G. Zakrzewski, S. Dapprich, A. D. Daniels, M. C. Strain, O. Farkas, D. K. Malick, A. D. Rabuck, K. Raghavachari, J. B. Foresman, J. V. Ortiz, Q. Cui, A. G. Baboul, S. Clifford, J. Cioslowski, B. B. Stefanov, G. Liu, A. Liashenko, P. Piskorz, I. Komaromi, R. L. Martin, D. J. Fox, T. Keith, M. A. Al-Laham, C. Y. Peng, A. Nanayakkara, M. Challacombe, P. M. W. Gill, B. Johnson, W. Chen, M. W. Wong, C. Gonzalez, and J. A. Pople, Gaussian, Inc., Wallingford CT, 2004.

GaussView, Version 3.09, Roy Dennington II, Todd Keith, John Millam, Ken Eppinnett, W. Lee Hovell, and Ray Gilliland, Semichem, Inc., Shawnee Mission, KS, 2003.

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

尚、Facioは、Gaussian社の公式ホームページ (Links to Related Sites) において「可視化ソフトウェア」として紹介されている。

http://www.gaussian.com/links_top_level.htm

- [3] GAMESS and PC GAMESS
M. W. Schmidt, K. K. Baldrige, 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)
<http://www.msg.ameslab.gov/GAMESS/GAMESS.html>
- A. A. Granovsky, PC GAMESS version 7.0,
<http://classic.chem.msu.su/gran/gamess/index.html>
- 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.
- M. W. Schmidt, K. K. Baldrige, 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)
- 尚、Facioは、GAMESSのおよびPC GAMESSの公式ホームページにおいて紹介されている。
<http://www.msg.ameslab.gov/GAMESS/Graphics/thirdparty.html>
<http://classic.chem.msu.su/gran/gamess/index.html>
- [4] TINKER
J. W. Ponder and F. M. Richards, *J. Comput. Chem.*, **8**, 1016-1024 (1987)
<http://dasher.wustl.edu/tinker/>
- [5] MSMS
Sanner, M.F., Spehner, J.-C., and Olson, A.J. (1996)
Reduced surface: an efficient way to compute molecular surfaces.
Biopolymers, Vol. 38., (3), 305-320.
<http://www.scripps.edu/~sanner/>
- [6] gnuplot <http://gnuplot.sourceforge.net>
- [7] WINE <http://www.winehq.com/>
- [8] Mesa <http://www.mesa3d.org/>
- [9] UTChem 2004: Yanai, T.; Kamiya, M.; Kawashima, Y.; Nakajima, T.; Nakano, H.;
Nakao, Y.; Sekino, H.; Paulovic, J.; Tsuneda, T.; Yanagisawa, S.; Hirao, K.
<http://utchem.qcl.t.u-tokyo.ac.jp/>
- [10] MolStudio <http://www.nec.co.jp/APSOFT/SX/molstudio/>