



Title	非経験的分子軌道法プログラムAMOSSの利用法 : グラフィックス編
Author(s)	遠藤, 勝義; 多田羅, 佳孝
Citation	大阪大学大型計算機センターニュース. 1996, 100, p. 50-63
Version Type	VoR
URL	https://hdl.handle.net/11094/66153
rights	
Note	

The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA

<https://ir.library.osaka-u.ac.jp/>

The University of Osaka

非経験的分子軌道法プログラムAMOSSの利用法

— グラフィックス編 —

大阪大学大学院工学研究科精密科学専攻 遠藤勝義、多田羅佳孝

1. はじめに

自然科学のさまざまな研究分野で計算機シミュレーションによる自然現象の解明が試みられ、コンピュータのハードウェアの急速な向上に伴い、理論、実験に続く第三の研究手段として、計算科学が注目されている。特に、量子（計算）化学の分野では、量子力学の第一原理に基づき電子状態を厳密に計算できる有効な方法として、非経験的（*ab initio*）分子軌道法のプログラムが開発され、極めて信頼性の高い予言力のある計算機シミュレーションを可能にしている。そして、原子・電子の挙動から、物性予測や材料設計、プロセス設計等を行ない、多方面で利用されている。

このような計算科学では、入力・出力に大量の数値データを処理することが不可欠であり、特に計算結果を画像表示することから、必要な物理情報を取り出し、物理現象の本質を把握し、一般概念をつかむことが望まれている。計算化学における分子軌道法による計算機シミュレーションも例外ではなく、多くの初期データを設定する必要がある、計算されている系の全容を把握することは熟練者といえども容易ではない。数値の羅列である初期データや計算結果として出力されたデータが、利用者の目的とする系の状態や物理現象をうまく記述できているかは、それらの数値データに多くの処理、たとえば画像表示により計算結果を可視化しなければわかりにくい。このデータ処理法が扱い易く多機能であるほど、利用者は扱っている物理現象の本質を捉えやすく、問題をより迅速に解決することができる。また、研究成果として公表した際にも、非常に理解されやすく、強いインパクトを聴衆に与えることができる。

前回に引続き、大阪大学大型計算機センターのSX-3のSUPER-UX（UNIX）上で利用できる非経験的分子軌道法のプログラムの一つである日本電気株式会社製のAMOSSの利用方法について「グラフィックス編」として紹介する。ここでは、AMOSS R3.0において強化された機能であり、計算科学では重要な要素である計算結果の可視化を中心に説明する。

2. AMOSS R2.0からR3.0への変更点

前回、AMOSSの利用法を書く機会を与えていただいたときに述べたように、AMOSSはR2.0からR3.0に変更されている。ここでは、R2.0からの変更点について簡単に述べてみたい。まず、ECP (Effective Core Potential) およびモデルポテンシャルを用いたエネルギー計算および構造最適化計算が可能となっている。ECP、モデルポテンシャルを用いたエネルギー計算では、内殻電子を適当なポテンシャルと置き換えて、価電子部分のみを基底関数として扱い、価電子エネルギーを計算する。このときECPはChristiansen等 [1-4]、モデルポテンシャルは酒井等 [5,6] によるものを用いており、それぞれH-Rn, H-Hgの基底関数系が

準備されている。次に、静電ポテンシャルの計算が可能となっており、その計算結果の静電ポテンシャル分布の可視化ができる。また、変更点の詳細については述べないが、プリポストプロセッサ部の機能の強化がみられている。

3. ポストプロセッサ部の機能

AMOSSは、入力データの作成や出力結果の解析を容易にするために専用のプリポスト部を提供している。プリポスト部は、プリプロセッサ部とポストプロセッサ部から構成されている。、プリプロセッサ部は、分子座標データの表示機能を有し、作成した分子の座標が正しいかどうかを、可視化された画像により確認することができる。また、制御データも簡単な操作で作成することが可能なため、短時間でデータを作成することができる。ポストプロセッサ部は、分子軌道などの計算結果を、等値面図、断面図などの種々の手法で可視化する機能を提供する。ここでは、ポストプロセッサ部の可視化する方法について、できるだけわかりやすく記述する。

4. ポストプロセッサ部を使用するための設定

ポストプロセッサ部を利用するためには、以下の設定を行う必要がある。

- ・ UNIXコマンドラインからプリポスト部を起動するためのサーチパスの設定と、プリポスト部がシステムのインストール先を参照するための環境変数の設定。
- ・ プリポスト部をAVS上で動作させるための環境設定。
- ・ 利用者のデータを格納するデータディレクトリの設定など、プリポスト部を快適に利用するための環境設定。

ここでは、ポストプロセッサ部を使用するために必要な種々の設定について具体例を交えながら説明する。具体例では、

```
ホームディレクトリが /home/ccup01/user3/*****
プリポスト部のインストール先が /usr/local
AVSのインストール先が /usr
AMOSSPPのバージョンはリリース 3.0
プリポスト部を起動するディレクトリが /home/ccup01/user3/*****/amosspp_work
各種データファイルを以下のディレクトリに置くものとする。
グラフィックファイル /home/ccup01/user3/*****/amosspp_work/amosscg
```

の場合を想定している。ただし、*****は利用者それぞれの課題番号を表す。

4.1 サーチパスと環境変数の追加

ここでは、UNIXコマンドラインからプリポスト部起動のためのサーチパスの追加と、プリポスト部がシステムのインストール先を参照するための環境変数の追加の方法について説明する。ログインシェルにCシェルを利用している場合、設定は、.cshrcファイルで行う。以下に、設定の具体的な方法を示す。

.cshrc ……利用者のホームディレクトリに置く。

(1)以下のディレクトリのパスを通す。(具体例の4～6行目)

```
/プリポスト部のインストール先/amosspp_v3/runtime  
/AVSのインストール先/avs/bin  
/プリポスト部のインストール先/amosspp_v3  
/プリポスト部を起動するディレクトリ
```

(2)環境設定部分に次の一行を加える。(具体例の8行目)

```
setenv AmossPPDirectory /プリポスト部のインストール先/amosspp_v3
```

(3)具体例

```
#  
# standerd .cshrc  
#  
set path = ( . /bin /usr/local/bin /sbin /usr/bsd /usr/ucb usr/local/amosspp_v3/runtime  
/usr/avs/bin /usr/local/amosspp_v3 /home/ccup01/user3/*****/amo sspp_work ) ……(1)  
setenv HOST `hostname`  
setenv AmossPPDirectory /usr/local/amosspp_v3 ……(2)  
set savehist=150  
set history=150  
set prompt=""hostname` $cwd<¥!>%"  
#  
#
```

4.2 プリポスト部をAVS上で動作させるための環境設定

ここでは、プリポスト部をAVS上で動作させるための環境設定について説明する。環境設定は、.avsrcファイルによって行うが、.avsrcファイルは参考ファイルavsrc.AMOSSPPから自分で作成しなければならない。以下に、.avsrcファイルの具体的な作成方法について述べる。

avsrc.AMOSSPP……/プリポスト部のインストール先/amosspp_v3/runtime のディレクトリの中にある。

.avsrc……利用者のホームディレクトリまたはプリポスト部を起動するディレクトリに置いておく。参考ファイルから自分で作成する。

(1)カレントディレクトリをホームディレクトリに移す。

(2)プリポスト部を起動するための専用ディレクトリを作成する。

```
% mkdir amosspp_work
```

(3)参考ファイルを作成したディレクトリにコピーする。

```
% cd amosspp_work  
% cp /usr/local/amosspp_v3/runtime/avsrc.AMOSSPP
```

(4)ファイル名の変更。

```
% mv avsrc.AMOSSPP .avsrc
```

(5)設定の変更。

(a)の部分（具体例の19行目）

```
# /usr/amosspp/amosspp_library/AMOSSPPLib  
を  
/プリポスト部のインストール先/amosspp_v3/amosspp_library/AMOSSPPLib  
ここでは  
/usr/local/amosspp_v3/amosspp_library/AMOSSPPLib  
に書き直す。
```

(b)の部分（具体例の37行目）

```
# Path /usr/avs  
を  
Path /AVSのインストール先/avs  
ここでは  
Path /usr/avs  
に書き直す。
```

(c)の部分（具体例の45行目）

ONYX本体で使用するときは、特に変更する必要はない。X端末から使用するときは、その端末にあった設定をする必要がある。

(d)の部分 (具体例の54行目)

```
# Applications /usr/amospp/runtime/AMOSSPPMenu
を
Applications /プリポスト部のインストール先/amospp_v3/runtime/AMOSSPPMenu
ここでは
Applications /usr/local/amospp_v3/runtime/AMOSSPPMenu
に書き直す。
```

(6)具体例

```
#####
#   AVS STARTUP FILE FOR AMOSS PRE/POST PROCESSOR           #
#                                     NEC CORPORATION 1995 #
#####
#
DisplayPixmapWindow    512x512+270+20
#
#####
# AVS LIBRARY SETTING                                     #
ModuleLibraries ¥
    $Path/unsupp_mods/Unsupported ¥
$Path/chem_lib/Chemistry ¥
$Path/avs_library/Animation ¥
$Path/avs_library/FiniteDiff ¥
$Path/avs_library/UCD ¥
$Path/avs_library/Volume ¥
$Path/avs_library/Imaging ¥
Path/avs_library/Supported ¥
    /usr/local/amospp_v3/amospp_library/AMOSSPPLib .....(a)
#   ^
#   |
#   THIS LINE IS AMOSS PRE/POST PROCESSOR LIBRARY SETTING.
#
#   If AMOSS PRE/POST PROCESSOR is installed directory '/usr/amospp',
#   add the library for AMOSS PRE/POST PROCESSOR is
#   '/usr/amospp/amospp_library/AMOSSPPLib'.
#   When add the AMOSS PRE/POST PROCESSOR library,
```

```

# DO NOT forget mark of '¥' after './Supported', this mark
# indicate continuance line.
#
#
#####
# PATH NAME SETTING FOR AVS
#
# Specifies the directory tree in which AVS is installed.
#
#Path /usr/avs .....(b)
#
#
#####
# VISUAL TYPE SETTING FOR AVS
#
# Specifies the visual type that your display capable of.
#
#VisualType PseudoColor .....(c)
#
#
#####
# AMOSS PRE/POST PROCESSOR APPLICATION MENU SETTING
#
# If AMOSS PRE/POST PROCESSOR is installed directory '/usr/amosspp',
# application menu setting is as follows.
#
Applications /usr/local/amosspp_v3/runtime/AMOSSPPMenu .....(d)
#
#
#####
# END OF AVS STARTUP FILE FOR AMOSS PRE/POST PROCESSOR #
#####

```

4.3 プリポスト部の環境設定

ここでは、利用者のデータを格納するデータディレクトリの設定など、プリポスト部を快適に利用するために必要な環境設定について説明する。環境設定は、.amossrcファイルによって行うが、.avsrcファイル同様参考ファイルSample.amossrcから自分で作成しなければならない。以下に、.amossrcファイルの具体的な作成方法について述べる。

Sample.amossrc ……/プリポスト部のインストール先/amospp_v3/runtime のディレクトリの中にある。

.amosrc ……利用者のホームディレクトリに置いておく。参考ファイルから自分で作成する。

(1)カレントディレクトリをホームディレクトリに移す。

(2)参考ファイルを作成したディレクトリにコピーする。

```
% cp /usr/local/amospp_v3/runtime/Sample.amosrc
```

(3)ファイル名の変更。

```
% mv Sample.amosrc .amosrc
```

(4)設定の変更。

具体例の(a)～(c)の部分 (具体例の21～23行目)

```
～ = /usr/amospp/data/～  
を  
～ = /AVSスタートアップファイル (.avsrc) を置いているディレクトリ/～  
ここでは  
～ = /home/ccup01/user3/*****/amospp_work/～
```

※ 具体例では /home/ccup01/user3/*****/amospp_work/ ～ の代わりに /usr1/*****/amospp_work/～となっているがこれは、/home/ccup01/user3 を /usr1で代用できるように設定されているため。

具体例の(d)の部分 (具体例の24行目)

```
AmossCGDirectory = /usr/amospp/data/amoscsg  
を  
AmossCGDirectory = /グラフィックファイルを置いているディレクトリ  
ここでは  
AmossCGDirectory = /home/ccup01/user3/*****/amospp_work/amoscsg
```

具体例の(e)の部分 (具体例の29行目)

```
BasisSetFileName = /usr/amospp/runtime/BASIS_FILE  
を  
BasisSetFileName = /基底関数系ファイルを置いているディレクトリ
```

ここでは

```
BasisSetFileName = /usr/local/amosspp_v3/runtime/BASIS_FILE
```

※ここでは、最初から用意されている基底関数系ファイルを用いているので /usr/local/amosspp_v3/runtime/BASIS_FILE となっているが、自分で作った基底関数系ファイルを用いている場合にはそのファイルを置いているディレクトリを指定する。

(5)具体例

```
*** AMOSS PRE/POST PROCESSOR DEFAULT DATA FILE
; *****
; * COPYRIGHT (C) NEC CORPORATION 1995 *
; * *
; * NEC CONFIDENTIAL AND PROPRIETARY *
; * *
; * ALL RIGHTS RESERVED BY NEC CORPORATION. THIS PROGRAM MUST *
; * BE USED SOLELY FOR THE PURPOSE FOR WHICH IT WAS FURNISHED *
; * BY NEC CORPORATION. NO PART OF THIS PROGRAM MAY BE *
; * REPRODUCED OR DISCLOSED TO OTHERS, IN ANY FORM, WITHOUT *
; * THE PRIOR WRITTEN PERMISSION OF NEC CORPORATION. USE OF *
; * COPYRIGHT NOTICE DOES NOT EVIDENCE PUBLICATION OF THIS *
; * PROGRAM. *
; *****
;
;This is a Default data file for AMOSS PRE/POST PROCESSOR.
;
;Default data file Version 1.10
;
$DATA_PATH
  AmossSysinDirectory = /usr1/*****/amosspp_work/sysin .....(a)
  AmossSysoutDirectory = /usr1/*****/amosspp_work/sysout .....(b)
  AmossDataDirectory = /usr1/*****/amosspp_work/sysout .....(c)
  AmossCGDirectory = /usr1/*****/amosspp_work/amosscg .....(d)
$END
;
;
$BASIS_FILE
BasisSetFileName = /usr/local/amosspp_v3/runtime/BASIS_FILE .....(e)
$END
;
```

:
:
(以下略)

5. ポストプロセッサ部の使用方法

ポストプロセッサ部は、分子軌道計算部のCGデータ（コンピュータグラフィックスデータ）、および出力データを取り扱うもので、これらのデータに対して計算結果の表示処理などの解析支援や、テキスト表示などの補助的な作業支援を行うことができる。以下にポストプロセッサ部の機能の例を列記する。

- ・分子構造表示機能
- ・分子軌道表示機能
- ・電子密度分布表示機能
- ・双極子モーメント表示機能
- ・静電ポテンシャル表示機能

ここではポストプロセッサ部の分子軌道表示機能、電子密度分布表示機能についての簡単な使用方法を述べる。

5.1 はじめに

計算結果を可視化するには、分子軌道計算部が実行終了時に作成するCGデータファイル（拡張子 .CGF）が必要になるので、分子軌道計算部を実行するときにCGデータファイルを作成するように設定しておく必要がある。ここでは、このことについては述べないので詳しいことはAMOSSの分子軌道計算部のマニュアル[7]を見ていただきたい。

5.2 分子軌道表示機能

分子軌道表示は、分子軌道関数値の三次元等値面図、または三次元断面図表示が可能である。以下に分子軌道表示機能の具体的な使用方法を示す。

(1)分子軌道表示機能の起動

ポストプロセッサ部のファンクションメニューの"MO"をマウスの左ボタンで押しファンクションサブメニューの"MO_function"までドラッグしマウスのボタンを離すと描画ウィンドウが開く。

(2)データの読み込み

ファイルブラウザの一覧の中から読み込みたいデータのファイル名を選択しクリックすると、描画ウィンドウ内にそのデータの分子構造が表示される。読み込みたいデータの

ファイルがファイルブラウザの一覧の中に無い場合は、"New Dir"をクリックし、CGファイルを置いているディレクトリを指定する。

(3)分子軌道関数値の計算条件と軌道番号の設定。

コントロールメニューの"MO function calculation"ブロックの"Setting"をクリックすると描画精度、軌道番号、計算範囲を設定するための新しいメニューが表示される。各設定を終え、コントロールメニューの"MO function calculation"ブロックの"Exec"をクリックすると設定にあった分子軌道関数が描画ウインドウ内に表示される。

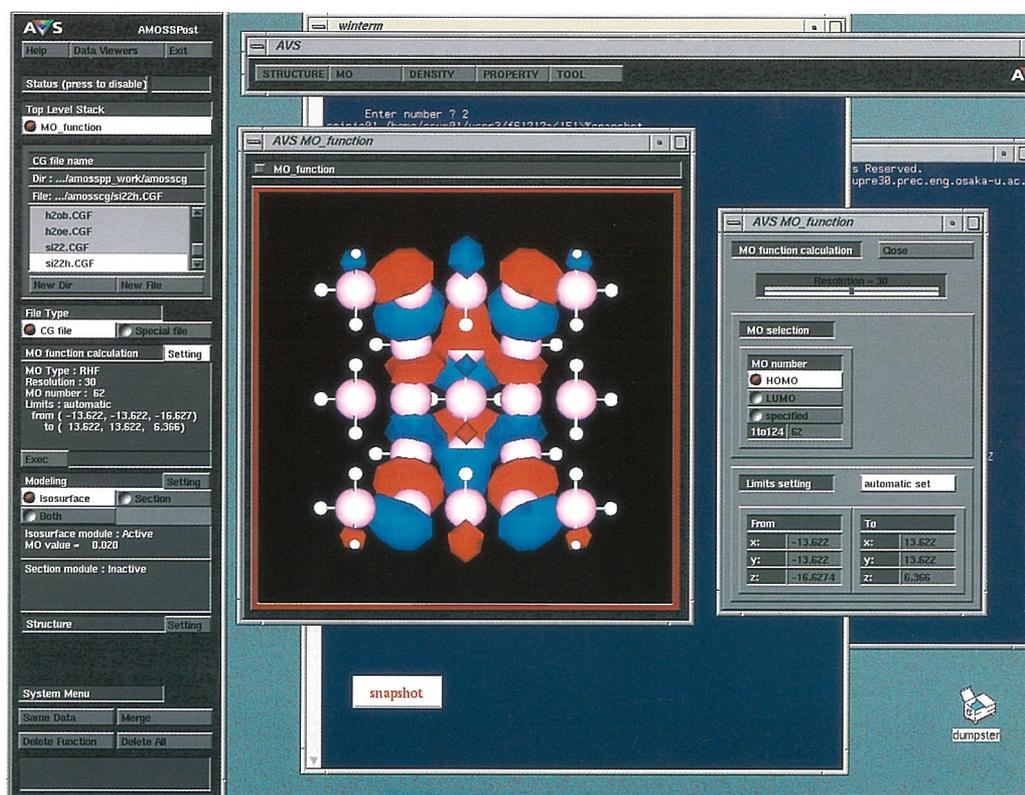


図1 分子軌道表示時の画面

5.3 電子密度分布表示機能

電子密度分布表示は、全電子密度およびスピン電子密度の三次元等値面図、または三次元断面図表示が可能である。以下に、電子密度分布表示機能の全電子密度分布表示の具体的な使用方法を示す。

(1)電子密度分布表示機能の起動

ファンクションメニューの"DENSITY"をマウスの左ボタンで押し、ファンクションサブメニューの"Total_Density"までドラッグし、マウスのボタンを離すと描画ウインドウが開く。

(2)データの読み込み

ファイルブラウザの一覧の中から読み込みたいデータのファイル名を選択しクリックすると、描画ウインドウ内にそのデータの分子構造が表示される。読み込みたいデータのファイルがファイルブラウザの一覧の中に無い場合は、"New Dir"をクリックし、CGファイルを置いているディレクトリを指定する。

(3)全電子密度値の計算条件の設定

コントロールメニューの"Total Density calculation"ブロックの"Setting"をクリックすると描画精度、計算範囲を設定するための新しいメニューが表示される。各設定を終了し、コントロールメニューの"Total Density calculation"ブロックの"Exec"をクリックすると、設定にあった全電子密度分布が描画ウインドウ内に表示される。

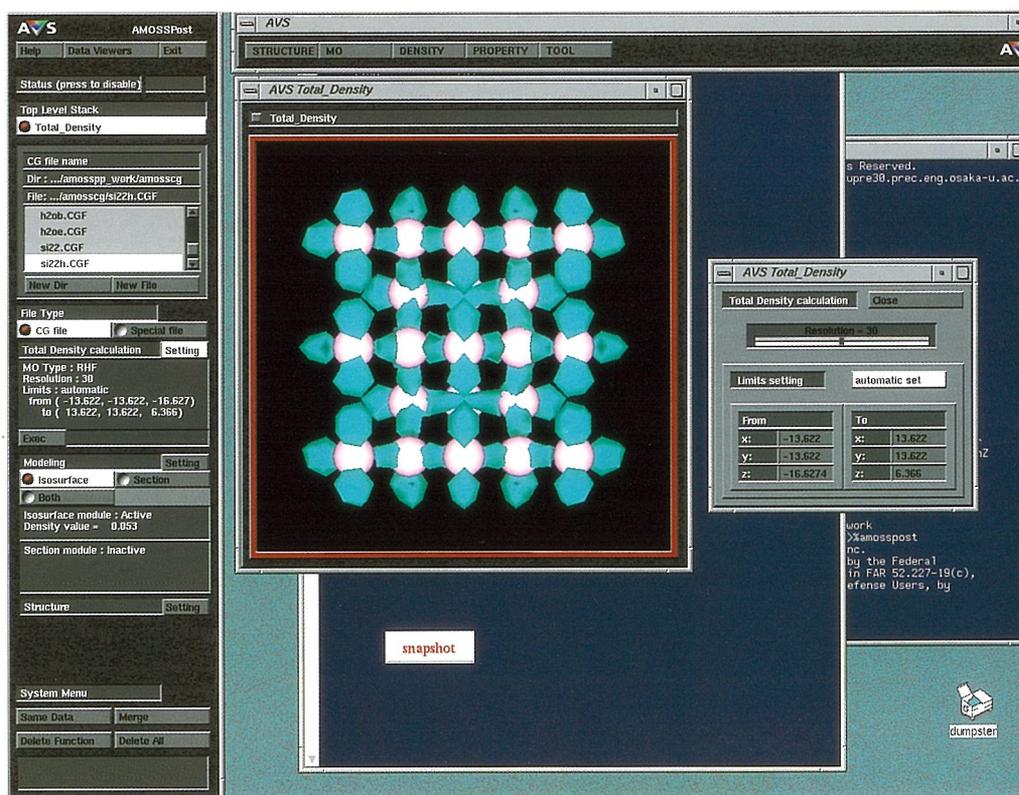


図2 電子密度分布表示時の画面

5.4 描画ウインドウの基本的な操作

描画ウインドウ内に表示されている分子の画像データに対しては、視点変更などの操作を行うことができる。ここでは、視点変更の基本的な操作方法を列記する。

・回転

描画ウインドウ内の表示されている分子上にマウスポインタを移動し、マウスの中ボタンを押しながらマウスポインタを描画ウインドウ内で上下左右に移動する。

・拡大・縮小

表示されている分子上にマウスポインタを移動し、シフトキーとマウスの中ボタンを押しながら、マウスポインタを移動する。マウスポインタを右や上方向に移動すると拡大し、左や下方向に移動すると縮小する。

・移動

表示されている分子上にマウスポインタを移動し、マウスの右ボタンを押したままマウスポインタを移動する。

5.5 画面の取り込み

描画ウインドウ内に表示されている分子の画像データを保存しておく、手持ちのパソコンで画像を表示できたり、画像の印刷が簡単にできるなど非常に便利であるので、画面の取り込み方について少し触れておく。ここでは `snapshot` というソフトを用いて画面を取り込む方法を述べるが、画面を取り込むためのソフトは、色々あるので好み応じた使いやすいソフトを使っていただきたい。

(1) `snapshot` の起動

コマンドラインから `snapshot` を起動する。

```
% snapshot
```

`snapshot` のメニューが表示される。

(2) 取り込みたい画面の指定

`snapshot` のメニューの上でマウスの左ボタンを押し、取り込みたい領域の1つの角までドラッグしマウスのボタンを離すと1つの角が選択される。次に、`snapshot` のメニュー上に残っているもう1つの角にマウスポインタを合わせてマウスの左ボタンを押し、取り込みたい領域のもう1つの（対角線になるような）角までドラッグし、マウスのボタンを離すと取り込みたい領域が選択される。

(3) ファイル名の指定

`snapshot` のメニューの上でマウスの右ボタンを押し、サブメニューの "New file name" までドラッグし、マウスのボタンを離すと(2)で指定した画面のファイル名を指定するための枠が表示される。表示された枠にマウスポインタを合わせてファイル名を指定する。この時マウスポインタが表示された枠に合っていないとファイル名を指定できないので注意が必要である。

(4) 画面の取り込み

`snapshot` のメニューの上でマウスの右ボタンを押し、サブメニューの "Save scm as (3)"

で指定したファイル名"までドラッグし、マウスのボタンを離すと指定した画像データがセーブされる。画像データは、SGIフォーマットでセーブされる。他のフォーマットに変換したい場合は、xvなどのソフトで変換することができる。

5.6 分子軌道表示、電子密度分布表示の例

ここでは、分子軌道表示および全電子密度表示の例を示す。図中の白色の球は水素、赤紫色の球はSiである。また、分子軌道表示において赤、青は波動関数の位相の違いを表している。

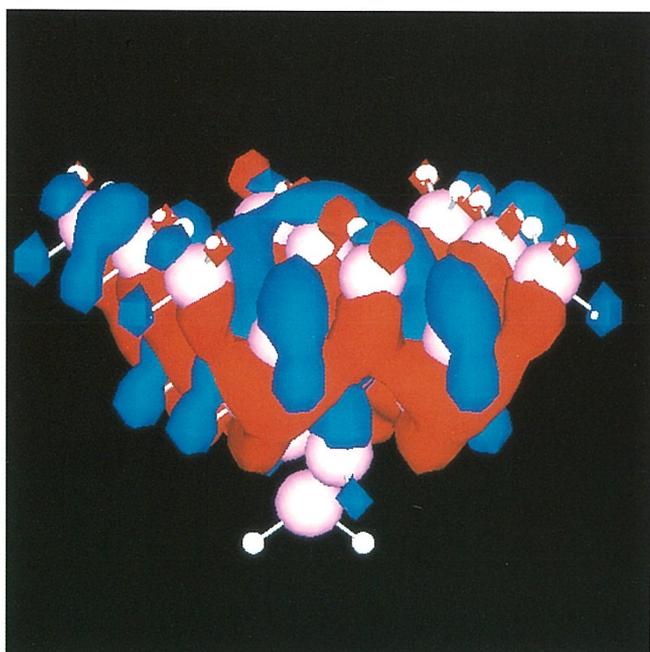


図3 分子軌道表示時の例

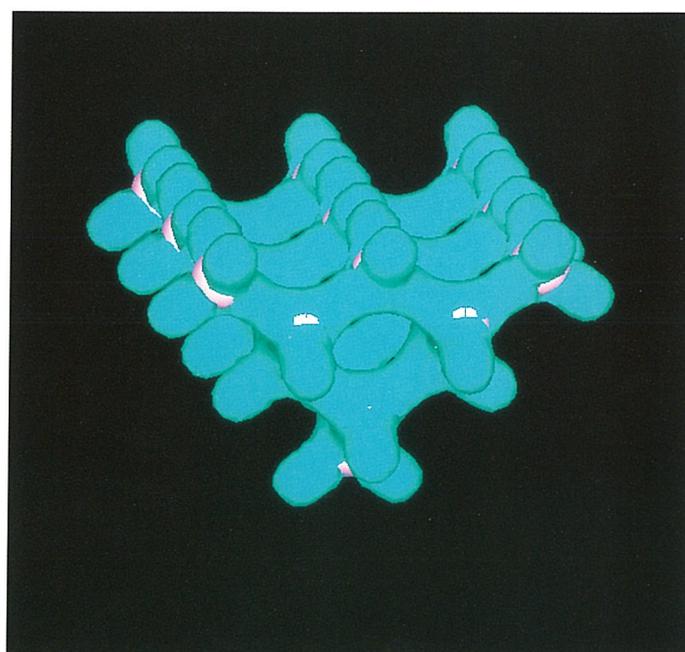


図4 全電子密度分布表示時の例

6. おわりに

本稿では、ポストプロセッサ部の使用方法について必要最小限のことだけを述べた。したがって、分子構造表示機能など、十分に説明できていないものも多いが不十分な点は、各人がプリポスト部のマニュアル[8]で補うということでご容赦願いたい。

なお、AMOSSを用いた研究成果を公表する場合は、日本電気株式会社成プログラムのAMOSSを利用したことを明記して頂きたいとのことである。

最後に、AMOSSを利用するに当たり適切な御意見・御協力を頂きました日本電気株式会社基礎研究所探索研究部 高田俊和氏、望月祐志氏、岡本穩治氏に心から感謝いたします。

参考文献

- [1] L. F. Pacios and P. A. Christiansen, *J. Chem. Phys* 82, 2664 (1985).
- [2] M. M. Hurley, L. F. Pacios, P. A. Christiansen, R. B. Ross and W. C. Ermler, *J. Chem. Phys* 84, 6840 (1986).
- [3] L. A. LaJohn, P. A. Christiansen, R. B. Ross, T. Atashroo and W. C. Ermler, *J. Chem. Phys* 87, 2812 (1987).
- [4] R. B. Ross, J. M. Powers, T. Atashroo, W. C. Ermler, L. A. LaJohn and P. A. Christiansen, *J. Chem. Phys* 93, 6654 (1990).
- [5] Y. Sakai, E. Miyoshi, M. Klobukowski and S. Huzinaga, *J. Comput. Chem.* 8, 226 (1987).
- [6] Y. Sakai, E. Miyoshi, M. Klobukowski and S. Huzinaga, *J. Comput. Chem.* 8, 256 (1987).
- [7] GUY42-2 SXシステムソフトウェア SUPER-UX 分子・材料設計支援システム AMOSS 利用の手引き<分子軌道計算編>, 日本電気(1994).
- [8] GUY44-1 SXシステムソフトウェア SUPER-UX 分子・材料設計支援システム AMOSS 利用の手引き<プリポスト編>, 日本電気(1995).