

Grafische Oberflächen für Gaussian: GaussView und UniChem im Vergleich

An der Humboldt-Universität zu Berlin stehen mit GaussView und UniChem zwei grafische Oberflächen für das quantenchemische Programm Gaussian zur Verfügung. Die Nutzung beider Oberflächen wird beschrieben, und die Gemeinsamkeiten und Unterschiede bei der Anwendung als *Pre-* und *Post-Processing*-Werkzeug für Gaussian werden aufgezeigt.

Einführung

Programme der numerischen Quantenchemie gehören zu den komplexesten Simulationswerkzeugen, die heute auf Computern benutzt werden. Dabei bezieht sich die Komplexität nicht nur auf deren Programmstruktur, sondern vielmehr soll damit auch die Formulierung syntaktisch richtiger und inhaltlich sinnvoller Eingabedaten verstanden werden. Intuitiv bedienbare grafische Oberflächen für quantenchemische Programme ermöglichen den schnellen Zugang zu deren Nutzung, ohne daß man sich erst anhand der Programmdokumentation in die Erstellung eines Eingabedatensatzes einarbeiten muß. Sowohl dieses *Pre-Processing* als auch die qualitativ hochwertige Visualisierung von Ergebnissen (*Post-Processing*) werden heutzutage von grafischen Schnittstellen übernommen. Somit kommen auch Anwender, die „nur mal ganz schnell“ Moleküleigenschaften berechnen wollen, zu ihrem Ziel. Wir wollen an dieser Stelle nicht in eine „philosophische Diskussion“ über *pro* und *contra* von grafischen Oberflächen für quantenchemische Programme verfallen, möchten aber darauf hinweisen, daß zwangsläufig mit dem vereinfachten *black-box*-Zugang Gefahren durch nichtsachkundige Nutzung der Programmpakete entstehen.

Das quantenchemische Programmpaket Gaussian von Gaussian Inc. ist der *De-facto*-Standard im Bereich der numerischen Quantenchemie. Es bietet unter der Vielzahl anderer quantenchemischer Programmpakete, wie etwa MOLPRO, TURBOMOLE, DGauss oder GAMESS/UK, die größte Funktionalität. Aus diesem Grunde hat es auch eine breite Installationsbasis in akademischen und industriellen Forschungseinrichtungen weltweit erreicht. *Gaussian94* steht interessierten Anwendern am Rechenzentrum der Humboldt-Universität (RZ/HU) und am Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin (ZIB) zur Verfügung. Die neue Gaussian-Version *Gaussian98 Rev. A3* ist auf den DEC-Arbeitsplatzrechnern am RZ/HU installiert.

Während bei anderen (insbesondere kommerziellen) Programmpaketen das grafische *front-end* ein integrierter Bestandteil des Software-Paketes ist, war man bezüglich Gaussian bis vor rund einem Jahr auf Dritprodukte angewiesen. Im Sommer 1997 wurde mit *GaussView* die erste Version einer eigenen grafischen Oberfläche für Gaussian von Gaussian Inc. angeboten.

Eines der oben erwähnten Dritprodukte mit einer Schnittstelle zum *Gaussian*-Paket ist die grafische Oberfläche der (ursprünglich bei Cray Research Inc. entwickelten) Simulationsumgebung *UniChem* von Oxford Molecular. *UniChem* bietet ein homogenes und eng gekoppeltes Interface zu den quantenchemischen Programmen MNDO, DGauss und CADPAC. Gaussian ist als Programm eines Drittanbieters – ähnlich wie künftig Q-Chem – loser an die grafische *UniChem*-Oberfläche gekoppelt, d.h., im Gegensatz zu den obigen drei Quantenchemieprogrammen werden z.B. keine Molekülinformationen während der Simulationsrechnung zur *UniChem*-Oberfläche übertragen. Vielmehr existiert für Gaussian ein *Translator*, der nach Beendigung der Gaussian-Rechnung die für die grafische Präsentation von Strukturen und Ergebnissen notwendigen Daten aus der formatierten *Gaussian-Checkpoint*-Datei erzeugt.

Die Architektur der *UniChem*-Simulationsumgebung ist als verteilte Anwendung realisiert (Abb. 1). Auf einem lokalen Arbeitsplatzrechner läuft

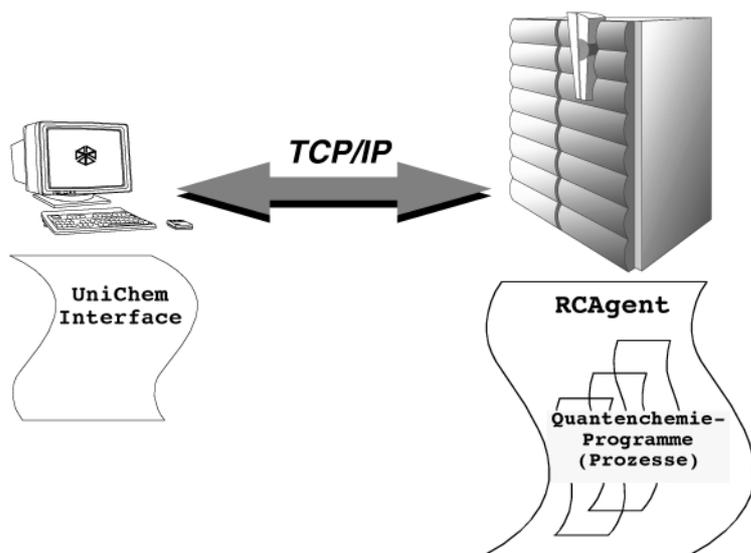


Abb. 1: Architektur von UniChem: das grafische Interface läuft auf der lokalen Workstation, die quantenchemischen Simulationsprogramme auf einem Compute-Server. Die Kommunikation zwischen dem UniChem-Interface und den quantenchemischen Programmen wird vom RCAgent vermittelt.

das grafische Interface, mit dessen Hilfe der Anwender Molekülstrukturen erstellen und modifizieren, Rechenjobs aufsetzen und Ergebnisse visualisieren kann. Die quantenchemischen Simulationsprogramme laufen auf den Cray-Rechnern des ZIB. Ebenfalls dort läuft der für die Kommunikation zwischen den Simulationsprogrammen und dem grafischen Interface zuständige Dämon (*Remote Control Agent – RCAgent*). Wird nun vom lokalen Arbeitsplatzrechner im UniChem-Interface eine Funktionalität ausgewählt, die eine Kommunikation mit dem Quantenchemieprogramm oder allgemein den Systemstatus abfragt, werden die entsprechenden Daten aus dem laufenden Simulationsprozeß oder vom System (z. B. NQE) über den *RCAgent* an das UniChem-Interface transparent weitergeleitet. In diesem Artikel sollen GaussView und das UniChem-Interface hinsichtlich ihrer Gemeinsamkeiten und Unterschiede bei der Anwendung als *Pre-* und *Post-Processing*-Werkzeug für Gaussian betrachtet werden.

Versionen und Plattformen

Die am RZ/HU installierte GaussView-Version ist 1.01. Diese Version unterstützt folgende Plattformen:

- Silicon Graphics ab Version IRIX 6.2 mit GL oder X11
- IBM AIX ab Version 4.1.5 mit X11
- Digital UNIX ab Version 4.0A mit OpenGL oder X11

Das aktuelle UniChem-Interface 4.1 läuft auf folgenden Plattformen:

- Silicon Graphics:
für MIPS R4400 ab IRIX 5.2 mit GL oder X11
für MIPS R10000 ab IRIX 6.2 mit GL oder X11
- IBM AIX ab Version 4.1 mit X11

Um insbesondere die Visualisierung und Manipulation von 3D-Daten schnell durchführen zu können, wird die Benutzung der Programmversionen empfohlen, welche die OpenGL oder GL (*Graphics Library*) unterstützen.

Zugang auf Rechnern der HU

Das Rechenzentrum stellt das UniChem-Interface auf einer Silicon Graphics Indigo2 *osiris* zur Verfügung. Zugang zu diesem Rechner haben alle Nutzer des Rechenzentrums, die eine Berechtigung für die Nutzung des Compute-Service haben. Diese Berechtigung muß in der Benutzerberatung beantragt werden.

Das GaussView-Interface ist ebenfalls auf der *osiris* sowie auf allen Arbeitsplatzrechnern von DEC, die bereits mit Digital Unix V. 4.0A ausgestattet sind (*adonis*, *kokyotos*, *lethe*, *styx*), installiert. Für den Zugang zu den Rechnern gilt das bereits Gesagte.

Aufruf auf HU-Maschinen

- UniChem:
Einloggen auf osiris.rz.hu-berlin.de

```
setenv DISPLAY <display you are sitting on>
unichem [ -x|X ]
-x|X wenn DISPLAY nicht GL-fähig
```

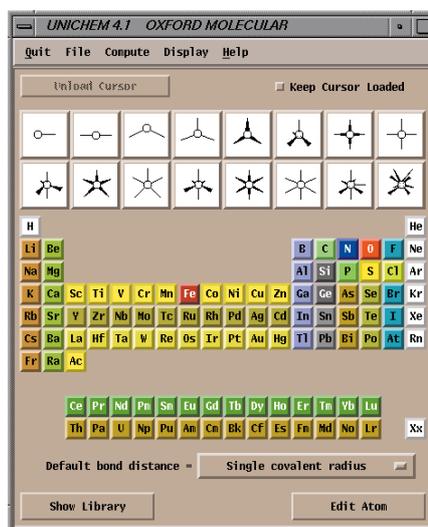


Abb. 2: UniChem-Hauptfenster mit Verknüpfungstopologien und PSE (s.a. Farbtafel I/1)

• GaussView:

Einloggen auf adonis.rz.hu-berlin.de oder *kokyotos*, *lethe*, *styx*

```
setenv DISPLAY <display you are sitting on>
gv oder xgv
```

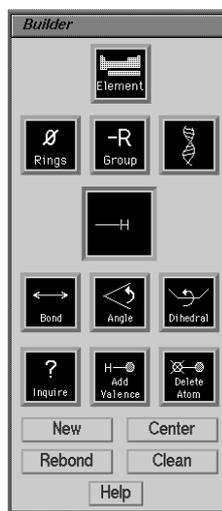


Abb. 3: Editorfenster von GaussView

Voreinstellungen

GaussView kann zum Starten von Gaussian-Rechnungen auf den DEC-Arbeitsplatzrechnern des RZ/HU genutzt werden. Die mit Calculate abgeschickten Gaussian-Rechnungen werden an das verteilte Batchsystem CODINE geschickt. CODINE bringt den Job dann auf einem der oben genannten DEC-Arbeitsplatzrechner zur Ausführung.

Das UniChem-Interface ist für alle Nutzer des Compute-Service des Rechenzentrums zugänglich. Für die Nutzung der Quantenchemie-Programme (MNDO, DGauss, CADPAC, Gaussian) ist jedoch der Zugang zu einem der Höchstleistungsrechner des ZIB (Cray J90, Cray T3E) zusätzlich im Rechenzentrum der HU zu beantragen.

Erstellen und Modifizieren von Molekülstrukturen

Gehen wir davon aus, daß wir eine neue Molekülstruktur entwerfen und deren Moleküleigenschaften mit

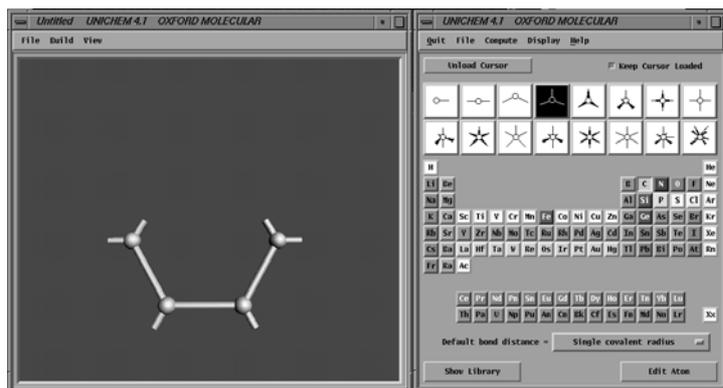


Abb. 4: Aufbau eines Benzenmoleküls mit UniChem: Verknüpfung der C-Atome mit trigonal-planarer Verknüpfungstopologie

Gaussian berechnen wollen. Zu diesem Zweck müssen wir uns mit dem jeweiligen Moleküleditor (*Builder*) befassen. Er stellt eine wichtige Komponente einer grafischen Umgebung für Molekülsimulationen dar. An einem einfachen Beispiel (Benzen) sollen UniChem und GaussView verglichen werden.

Editieren von Molekülstrukturen mit UniChem

Mit dem Aufruf von UniChem erhält man das Hauptfenster von UniChem (Abb. 2). Es enthält im wesentlichen eine Auswahl von Verknüpfungstopologien, das Periodische System der chemischen Elemente (PSE) und den Zugang zu den mitgelieferten Strukturbibliotheken (s. u.). Unter dem *Pull-down*-Menü *File - New* erhält man ein leeres Fenster, in dem man nun neue Strukturen aufbauen kann. Zum Aufbau des Benzens wird zunächst der Atomtyp (hier Kohlenstoff C) und dann die Verknüpfungstopologie (hier trigonal-planar) ausgewählt. Unter Nutzung der *Keep Cursor Loaded*-Option gelingt durch Anklicken der freien Valenzen am Kohlenstoffatom der Aufbau des Benzens schnell (Abb. 4).

Nach Verknüpfung der letzten C-Bindung (*Build - Bonds - Join Bonds*) können die Wasserstoffatome an die restlichen freien Valenzen angefügt werden (*Build - Add Hydrogens*).

Für den Aufbau größerer Moleküle stehen einige Strukturbibliotheken im UniChem-Format zur Verfügung, die auch durch eigene Strukturen ergänzt werden können. Die mitgelieferten Bibliotheken enthalten Aminosäuren, organische Moleküle und funktionelle Gruppen, zyklische Strukturen, die einen 3er- bis 7er-Ring sowie Mehrfachringssysteme enthalten. Zusätzlich sind einige Übergangsstrukturen aufgenommen worden. Weiterhin ist der Import von Strukturen im PDB-, XYZ-, Z-Matrix- und *Cambridge Protein Database*-Format möglich.

Editieren von Molekülstrukturen mit GaussView

Nach Aufruf von GaussView erhält man das Fenster des Moleküleditors (Abb. 3) und ein leeres Fenster zum

Editieren des neuen Moleküls. Im Editorfenster *Builder* sind zunächst die im oberen Teil angeordnete PSE-Ikone, die Ikonen der Strukturbibliotheken für Ringstrukturen, funktionelle organische Gruppen, Aminosäuren u.a. sowie der in der dritten Reihe dargestellte aktive Atomtyp von Interesse. Auch hier soll nicht die in der Ringbibliothek enthaltene Phenolstruktur benutzt werden, sondern das Benzen per Hand aufgebaut werden. Nach Anklicken der PSE-Ikone kann aus dem PSE der Kohlenstoff aktiviert werden. Bestätigt wird dies durch Darstellung des C-Atoms mit tetragonaler Verknüpfungstopologie in der zentralen Ikone des Editor-

Fensters. Durch Anklicken dieser Atomtyp-Ikone wird die trigonal-planare Topologie selektiert. Durch wiederholtes Anklicken der freien C-Valenz gelingt auch hier der Aufbau im Strukturfenster schnell (Abb. 5). Allerdings ist die Zusammenführung der C-Atome zur Ringstruktur nicht so intuitiv steuerbar (Änderung von Diederwinkeln, Löschen von freien Valenzen). Um den Einbau überzähliger Wasserstoffatome zu vermeiden, empfiehlt es sich, bei den ersten Schritten mit *View - Show Labels* sich die Atome und freien Valenzen anzeigen zu lassen. Anschließend sollte die Struktur als *Gaussian File Type (*.com)* abgespeichert werden. Beim Abspeichern der Geometriedaten ist zu beachten, daß die unter *File - Save* angebotene *File Type Option Gui/Geo* ein „Relikt“ des AMPAC-GUI ist und von GaussView nicht wieder eingelesen werden kann.

Visualisierung von Molekülstrukturen: Darstellungsarten

Bisher wurden in den Abbildungen die Standarddarstellungsart für Atome und Bindungen gezeigt (*Ball & Stick*). UniChem und GaussView bieten daneben weitere Darstellungsvarianten an. UniChem bietet neben der *Ball&Stick*-Darstellung die *Stick*-, *Kalotten*-, *van-der-Waals*- sowie eine reine *Atom*-Darstellung an (siehe *View - Display Style*). Insbesondere die primitiv erscheinende *Linien*darstellung wird man zu schätzen

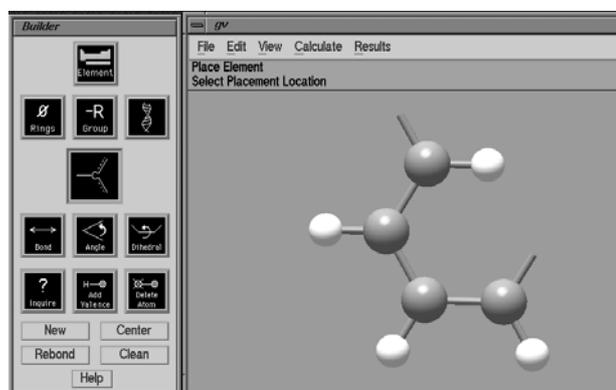


Abb. 5: Aufbau des Benzenmoleküls mit GaussView

wissen, wenn man UniChem *remote* per X11 über eine langsame Netzverbindung (Modem zu Hause) nutzt.

Mit GaussView kann man sich die Moleküle neben der *Ball&Stick*-Darstellung auch in einer *Ball&Bond-Type*- und *Stick*-Darstellung anschauen. Insbesondere für größere Moleküle, die zunehmend auch für nicht-empirische Rechnungen auf neuen Arbeitsplatzrechnern interessant werden, wird man die Liniendarstellung vermissen.

Joberstellung und Statuskontrolle

Wir wollen nun eine Strukturoptimierung von Benzen durchführen und das höchstbesetzte Molekülorbital (*Highest Occupied Molecular Orbital - HOMO*), das niedrigste unbesetzte MO (*Lowest Unoccupied MO - LUMO*), die Elektronendichte sowie das elektrostatische Potential auf einem Gitter berechnen, um es anschließend per 3D-Visualisierung betrachten zu können.

Optimierung unter GaussView

Mit Calculate - G94 gelangt man in das GaussView Setup-Menü. Unter Job Type wählen wir Optimization. Die Einstellungen unter Method (Restricted, Hartree-Fock) können übernommen werden. Als Basis Set nehmen wir 3-21G. Zwecks Vergleichbarkeit der folgenden Rechnung mit UniChem und für die Visualisierung der MOs tragen wir bei Additional Keywords noch Opt=(Grad, Cartesian, MNDOFC) SCF=(Direct, Tight) FChk=All ein, wobei letzterer Eintrag für die Generierung der Oberflächen in GaussView notwendig ist (s.u., anstelle der formatierten Checkpoint-Datei wäre auch die Verwendung der normalen Checkpoint-Datei möglich). Mit Submit... wird der Input an das CODINE-Batchsystem geschickt. Daher bekommt man auch sofort eine zunächst irreführende Meldung von GaussView, daß der Job beendet wurde - es ist nur die Quittierung vom CODINE-System (Calculate - Current Jobs - Log...).

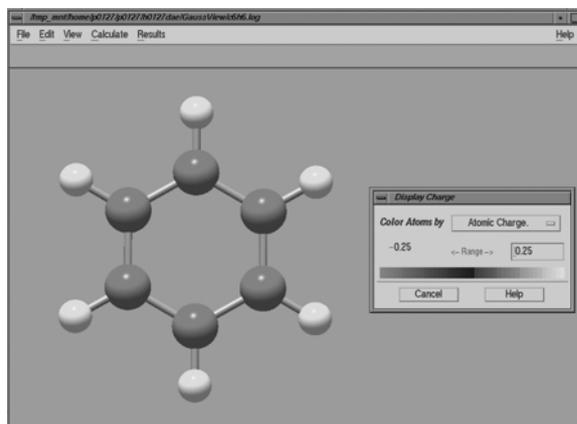


Abb. 6: GaussView: Farbkodierte Darstellung der Atomladungen für Benzen

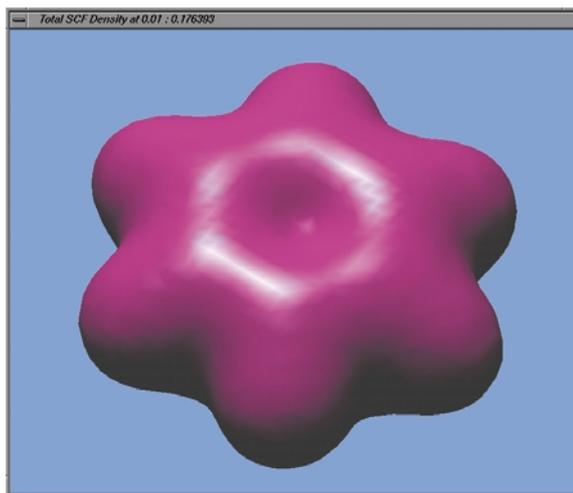


Abb. 7: GaussView: Isofläche der Elektronendichte in 3D-Darstellung (s.a. Farbtabelle II/2)

Wenn eine Maschine frei ist, ist die Optimierung nach gut 2 Minuten fertig. Zum Einlesen der optimierten Struktur wird der Gaussian-Output in GaussView importiert (File - Open - File Type *.log). Unter Results findet man den Zugang zu Ergebnispräsentationen: Summary zeigt eine Zusammenfassung der Rechnung an, mit Charges kann die Atomdarstellung ladungsabhängig farbkodiert werden (Abb. 6) und mit View kann die Gaussian-Ausgabe mit dem vi-Editor betrachtet werden.

Für die Generierung von Isoflächen der Elektronendichte und der Molekülorbitale benutzen wir die formatierte Gaussian-Checkpoint-Datei Test.FChk (Vorsicht bei mehreren Jobs in der Queue: da Gaussian die formatierte Checkpoint-Datei immer unter diesem Namen bezeichnet, können bereits in HOME existierende Test.FChk-Dateien überschrieben werden). Nach Umbenennung (z. B. in c6h6.fchk) wird die Datei in GaussView importiert. Unter Results - Surfaces... können jetzt die Gitterdaten und Isoflächen generiert werden. Mit Generate erreichen wir das Fenster, wo die Nummer des MOs bzw. die Elektronendichte selektiert und die Gitterauflösung definiert werden kann. HOMO bzw. LUMO haben die Nummer 21 bzw. 22, und wir wählen die Coarse-Auflösung.

Hinweis: Falls es während der Generierung der Gitterdaten zu Fehlermeldungen hinsichtlich *File Quota* kommt, prüfen Sie doch bitte in Ihrem HOME-Verzeichnis den Inhalt von Verzeichnissen mit dem Namen .gv-* (z. B. mit `cd ~; ls -ld .gv-*`) nach. Diese Verzeichnisse enthalten temporäre Gitterdaten und könnten u.U. am Ende einer GaussView-Sitzung nicht aufgeräumt worden sein.

Die Visualisierung der Isoflächen für das HOMO und LUMO bzw. die Elektronendichte wird durch Aktivieren im Surface-Fenster möglich (Einstellen des Isodensity Value, Apply). Beispiele für die Darstel-

lung einer Isofläche der Elektronendichte findet man in Abb. 7, die des HOMO und LUMO in Abb. 8.

Optimierung unter UniChem

Zunächst sollte die editierte Struktur mit einem Namen (z. B. als C₆H₆) versehen und auf Platte gesichert werden (File - Save As [UniChem-Format]). Benzen hat eine symmetrische Molekülstruktur und da die Ausnutzung der Symmetrie die Gaussian-Rechnung beschleunigt, lassen wir uns durch das UniChem-Interface die Symmetrie unserer Struktur (Build - Symmetry ...) bestätigen. Im Normalfall sollte uns die D_{6h}-Punktgruppe angezeigt werden.

Bevor wir uns weiter die Mühe machen, die Eingabe zu erstellen, fragen wir nach, ob der Zugang zum Cray-Server über das Netz überhaupt möglich ist und der *RCAgent* läuft. Dazu wird im UniChem-Hauptfenster Compute - System Status ... ausgewählt und bestätigt, daß wir den Status von *crassus.zib.de* haben wollen. Wenn alles funktioniert, erhalten wir die aktuelle *NQS Batch Queue Summary*.

Beginnen wir mit der Erstellung eines Gaussian-Jobs. Dazu wird im Hauptfenster das *Pull-down*-Menü Compute - Setup and Launch ... aktiviert. Da wir mit Gaussian rechnen wollen, wird unter Chemistry code Gaussian selektiert. Auf der rechten Seite des Setup and Launch-Fensters sind (spätestens vor dem Abschicken) geeignete Werte (s. u.) für die benötigten Hardware-Ressourcen (CPU-Zeit, Hauptspeicher, Plattenplatz) einzutragen.

Mit Setup ... beginnen wir, die Aufgabenstellung für unseren Gaussian-Job zu definieren. Es können alle Standardeinstellungen im Fenster unverändert übernommen werden:

- Charge 0, Multiplicity 1
- SCF method: Hartree-Fock RHF
- Correlation treatment: None
- Calculation: Geometry optimization
- Geometry: Cartesians

Dies gilt ebenso für Optimization Options ... und SCF Options ...

In Basis Sets ... wird wieder der 3-21G-Basissatz ausgewählt. Unter Properties ... werden die

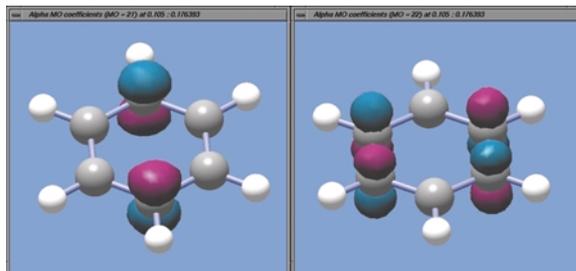


Abb. 8: GaussView: Molekülorbitale des Benzens - HOMO (links) und LUMO (rechts) (s.a. Farbtafel II/1)

Optionen Molecular Orbitals - HOMO and LUMO only, Total electron density und Electrostatic potential ausgewählt. Weiterhin wird bei Volumetric grid: Auto-size aktiviert. Nach entsprechender Bestätigung mit OK werden im Setup and Launch Fenster unter Data Managment ... die Rechner und Dateipfade angegeben, unter denen die Ergebnisdateien abgespeichert werden sollen. Auf der linken Seite des Fensters bleiben die Angaben für die temporären Gaussian-Dateien für diese Demo-Rechnungen unverändert inaktiviert. Auf der rechten Seite werden die Rechner, Nutzerkennungen und Dateipfade für die Gaussian-Ausgabe (Save text output), die binäre UniChem-Datei mit den (skalaren) numerischen Ergebnissen (Save non-volumetric data) und die UniChem-Datei mit den 3D-Volumendaten (Save volumetric data) angegeben. Für die Visualisierung sollten die UniChem-Dateien (*.nvlG und *.volG) auf *osiris* abgelegt werden.

Im Setup and Launch ... müssen jetzt noch die Resource limits (rechte Spalte) eingetragen werden. Für unser kleines System wählen wir:

- Job time: 900 [s]
- Per process time: 890 [s]
- Job memory: 16 [Mwords]
- Per process memory: 16 [Mwords]
- Number of CPUs: 3

Die Rechnung soll interaktiv durchgeführt werden, also wird Mode: Interaktive aktiviert. Durch Bestätigung mit Launch und der Validierung durch Eingabe der Paßwörter für den lokalen Arbeitsplatzrechner *osiris.rz.hu-berlin.de* und den Cray-Server *crassus.zib.de* wird der Eingabjob auf die Cray J90 transferiert und gestartet.

Die optimierte Struktur wird nach 6 Optimierungsschritten gefunden und benötigt knapp 7 CPU-Minuten¹. Je nach aktueller Last auf der Maschine wird man etwa 10 Minuten warten müssen. Man kann sich zwischenzeitlich unter Compute - Monitor Jobs ... Show Status über den aktuellen Fortgang der Rechnung anhand des Status (Job status, Application status), der bisher verbrauchten CPU-Zeit (Job time used), des benötigten Hauptspeichers (Memory used) sowie der bisher ausgeführten Gaussian-Links (Chemistry/ Application summary) informieren. Durch Update Info können die Informationen aktualisiert werden. Die Beendigung von Gaussian und das Starten des Translators *gxlator* werden durch entsprechende Nachrichten in Job summary quittiert. Den Status der Übertragung der vom *gxlator* erzeugten UniChem-Dateien zum lokalen Arbeitsplatzrechner findet man unter der File transfer summary.

¹ Das gewählte Beispiel ist zu klein, um die Vorzüge der Vektorarchitektur der Cray J90 zu demonstrieren.

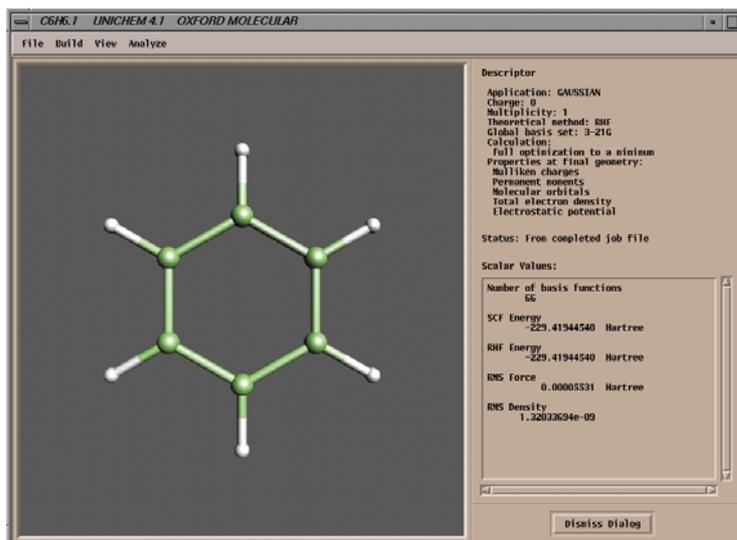


Abb. 9: UniChem: optimierte Molekülstruktur und Ergebnisübersicht (s.a. Farbtafel I/6)

Visualisierung von Moleküleigenschaften

Nach erfolgreicher Durchführung der Optimierung und der Berechnung einiger 3D-Eigenschaften wenden wir uns nun deren Visualisierung (*Post-Processing*) zu.

3D-Visualisierung mit UniChem

Zur Visualisierung der Ergebnisse in UniChem wird die vom Gaussian-Translator erzeugte Datei mit den skalaren Daten (*.nv1G) geladen (File - Open). Im neu geöffneten Fenster werden die optimierte Struktur und eine Übersicht über Berechnungstyp, Basissatz und die wichtigsten numerischen Resultate dargestellt (Abb. 9).

Zur 3D-Visualisierung von Moleküleigenschaften müssen deren Daten per Analyze - Open Volumetric Data ... und Angabe der *.volG-Datei in die Oberfläche geladen werden. Nun ist die Visualisierung sol-

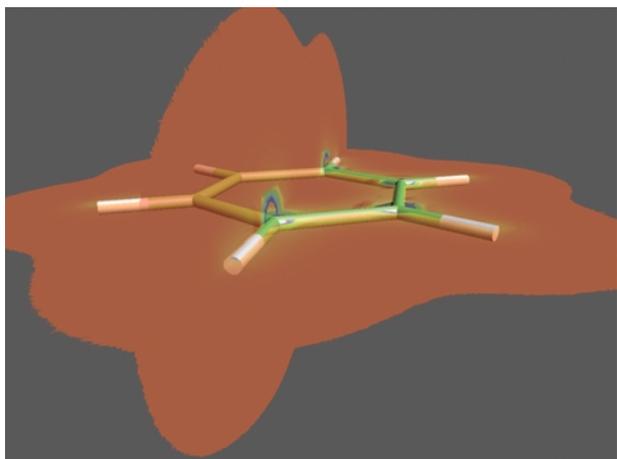


Abb. 10: UniChem: Elektronendichte auf zwei senkrecht zueinander stehenden Schnittebenen in durchsichtiger Darstellung (s.a. Farbtafel I/5)

cher Eigenschaften wie der Elektronendichte, von Molekülorbitalen (z. B. HOMO, LUMO) oder des elektrostatischen Potentials möglich. Die Präsentation dieser 3D-Daten kann entweder als 2D-Schnitt oder als 3D-Isofläche erfolgen. Weiterhin können auf definierten Flächen Moleküleigenschaften farbkodiert projiziert werden (Colored Surfaces ...).

In Abb. 10 wird die Elektronendichte in zwei senkrecht zueinander stehenden Schnittebenen in transparenter Darstellung visualisiert. Abb. 11 zeigt die Elektronendichte in der Isoflächendarstellung. In Abb. 12 findet man die Projektion des elektrostatischen Potentials auf eine Isofläche der Elektronendichte. Schließlich sind in Abb. 13 das HOMO und LUMO in der 3D-

Darstellung dargestellt.

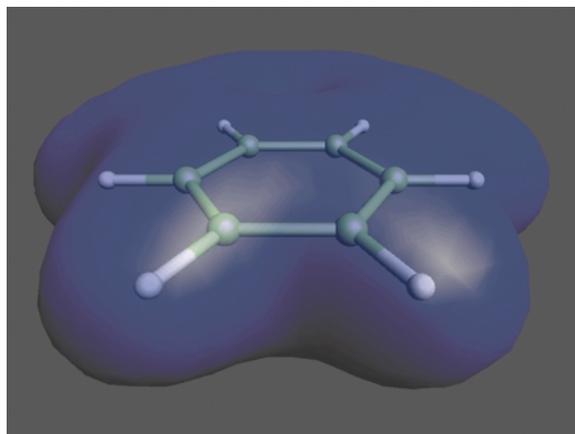


Abb. 11: UniChem: Isoflächendarstellung der Elektronendichte (s.a. Farbtafel I/2)

Vor- und Nachteile

Wir haben die grundlegenden Schritte der Nutzung der GaussView- und der UniChem-Oberfläche für Rechnungen mit Gaussian demonstriert. Insgesamt hinterläßt GaussView in der jetzigen Version noch einen eher spartanischen Eindruck. Die Bedienung ist nicht so intuitiv möglich wie man es von UniChem gewohnt ist. GaussView ist dank der OpenGL-Unterstützung auf einer breiteren Plattformbasis verfügbar (z. B. DEC) und daher für Institutionen interessant, die nicht über Arbeitsplatzrechner von SGI verfügen. Insgesamt macht das seit langem verfügbare UniChem-Interface den reiferen Eindruck und wartet mit einer größeren Anzahl von Visualisierungsoptionen für 3D-Eigenschaften auf. So sind im UniChem auch im Vergleich zu GaussView mehr Optionen zur Analyse der Molekülschwingungen (Skalierung, Lorentz-Verbreitung) enthalten, die wir hier nicht betrachten haben.

Der wichtigste Punkt, worin sich beide Produkte am klarsten unterscheiden, betrifft das Umfeld ihrer

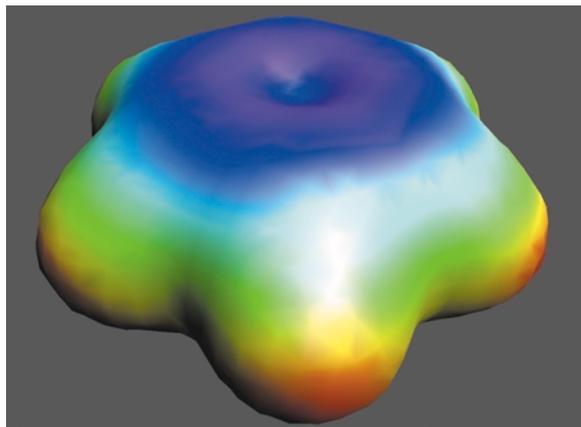


Abb. 12: UniChem: Projektion des elektrostatischen Potentials auf eine Isofläche der Elektronendichte (s.a. Farbtafel I/3)

Anwendung: GaussView ist in seiner jetzigen Version klar als Einzelplatzsystem entworfen, während UniChem von vornherein als verteilte Anwendung konzipiert war, da es als Interface für die auf Cray-Servern laufenden Quantenchemiecodes entwickelt worden ist. Damit einher geht der unterschiedliche Grad der Unterstützung von Batch-Systemen und der Jobkontrolle. Somit ist das Software-Design von UniChem besser an das sich immer stärker etablierende Umfeld von verteilten Rechnerressourcen, insbesondere im Hochleistungsbereich, angepaßt.

Wir wollen zum Abschluß die Vor- und Nachteile beider Oberflächen zusammenfassen.

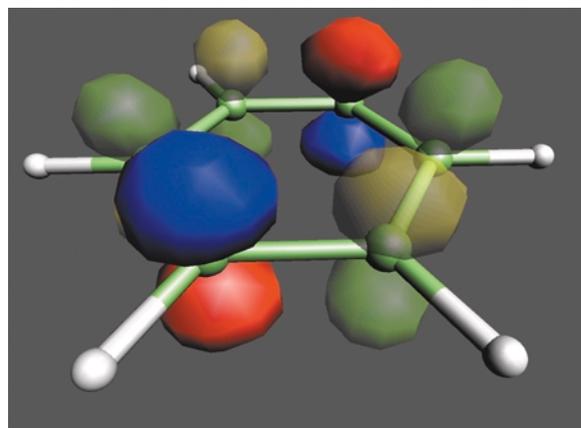


Abb. 13: UniChem: HOMO (undurchsichtig) und LOMO (transparent) des Benzens (s.a. Farbtafel I/4)

GaussView

Vorteile:

- portable Implementierung in OpenGL, lauffähig auf unterschiedlichen Plattformen (SGI, DEC, IBM, HP, Intel)
- ausreichend gute Pseudo-3D-Darstellung der Molekülstruktur unter X11 (möglicherweise ausreichend für Publikationen)

- Verarbeitung von Gaussian Z-Matrizen mit symbolischen Werten
- direkte Unterstützung der Generierung von 3D-Gitterdaten aus Checkpoint-Datei

Nachteile:

- Einzelplatz-Design: keine direkte Unterstützung von Batch-Systemen und keine Jobkontrolle vom GUI möglich, Einschränkungen der Dateipfade für Input
- keine ausreichende Online-Hilfe
- 3D-Visualisierung beschränkt auf MOs und Elektronendichte, keine Projektionen auf definierte Oberflächen

UniChem

Vorteile:

- Client-Server-Architektur mit Jobkontrolle und Remote-Zugriff auf Programm- und Maschinenstatus des Compute-Servers
- weitestgehend intuitiv bedienbar, einfach zugänglicher Moleküleditor, einschließlich 3D-Editorfunktionen (z. B. 3D-Cursor)
- Projektion von Moleküleigenschaften auf ausgewählte Oberflächen (*van-der-Waals*, *solvent accessible*)
- mehrere Darstellungsarten für 3D-Eigenschaften (Gitter, transparente oder undurchsichtige Fläche), Konturliniendarstellung oder Isoflächen
- 2D-Schnitte im Raum in farbkodierter oder Konturliniendarstellung
- HTML und PostScript On-line-Dokumentation

Nachteile:

- primitive Strukturdarstellung unter X11
- keine OpenGL-Version

Anbieter und Kontaktadressen

Gaussian und GaussView

Gaussian, Inc.

Carnegie Office Park, Building 6, Suite 230

Carnegie PA 15106

USA

Email: info@gaussian.com

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

UniChem

Oxford Molecular Group

The Medawar Centre

Oxford Science Park

Oxford OX4 4GA

UK

URL: <http://www.oxmol.com/prods/unichem/>

oder in Deutschland:

Oxford Molecular Germany

Computer Chemie Centrum

Nägelsbachstraße 25

D-91052 Erlangen

Daniela-Maria Pusinelli, Thomas Steinke

pusinelli@rz.hu-berlin.de

steinke@zib.de