



Title	非経験的分子軌道法プログラムGaussian94の利用法
Author(s)	花村, 光泰; 増田, 典雄
Citation	大阪大学大型計算機センターニュース. 1997, 103, p. 63-71
Version Type	VoR
URL	https://hdl.handle.net/11094/66195
rights	
Note	

The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA

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

The University of Osaka

日本電気株式会社

第一コンピュータ事業本部スーパーコンピュータ販売推進本部

花村 光泰 増田 典雄

1. はじめに

計算化学・計算物理という言葉が使われ始めて久しい。今日では数値計算アルゴリズムの進歩と計算機の高性能化により、大学を始め企業においても日常的に利用される領域となった。特に機械電機産業における新素材設計や製薬、化学系企業における分子設計が例として挙げられる。これら企業においては、開発期間の短縮や資源の無駄使い防止のために重要となっている。

計算化学・計算物理の世界においてコンピュータの性能は極めて重要である。また、これらはコンピュータ界の花形ともいえるスーパーコンピュータの中心アプリケーションの一つを担っている。一方最近では、スーパーコンピュータ無くしては計算できないと言われていたこの分野に変化が生じてきた。それはメインフレームを超える計算性能を持つスーパーワークステーション、さらに並列処理による高演算性能を有する並列コンピュータが登場してきたからである。これらのコンピュータシステムは従来のベクトル型スーパーコンピュータに較べて価格性能比が優れていると云われている。このようなハードウェアの変化に対応して計算化学・計算物理の世界でも従来のスーパーコンピュータ信仰から脱却し始め、ワークステーションへの移行が進み、さらに並列コンピュータ向きにプログラムの変更、あるいは並列アルゴリズムの開発へと向っている。この結果従来高価であった計算化学・計算物理の計算が比較的になり、さらに広く普及する大きな原動力になっている。

計算化学分野では ADF を始め、Gamess、SPARTAN、AMBER、CHARMm、GROMOS など多くのプログラムが開発されてきたが、その歴史的及び利用者の多さから、Gaussian は燦然と輝く存在であり、その豊富な機能は他の追従を許さない。更に、スーパーコンピュータ SX-4 での Gaussian の実効性能は、ベクトル化アルゴリズムの採用により、極めて高性能であり、特に大規模計算においては 1GFLOPS を越える性能を達成している。

本章では、この Gaussian シリーズのうち最新のものである Gaussian94 に関する機能、利用方法について紹介する。

2. Gaussian 概要

Gaussian は非経験的分子軌道法に基づき数値計算によって分子の物理的・化学的性質を解析するプログラムです。この Gaussian は新素材の研究開発や製造における分子設計、材料設計などに幅広く利用できます。

コンピュータを使って分子の性質を解析するにはいくつかの方法があります。このうち、種々の実験データや過去の経験から得られたさまざまなパラメータを用いる古典的な分子計算の方法があります。この方法は比較的計算量が少なく、ワークステーションでも計算が可能です。その反面、高精度の解は得られません。一方、実験データや経験則を使わない非経験的分子軌道法は厳密に解析するために高精度の解を求めることができます。しかしながら、この方法は膨大な計算量を必要とするためにワークステーション等では難しく、スーパーコンピュータの性能を必要とする手法といえましょう。

Gaussian はカーネギーメロン大学の Dr. J. A. Pople の研究グループが最初に開発したシステムです。現在世界中で利用されている最も有名なプログラムの一つといえます。その後 Dr. Pople が Gaussain, Inc. を設立し、現在ではこの会社が Gaussian の機能アップ及び販売を行なっています。

SX シリーズにおける Gaussian としましては、'91 年 11 月に SX-3 シリーズに Gaussian90 が移植されました。それ以後、Gaussian92、そして現在最も新しい Gaussian94 へと引き継がれております。現在北米、欧州、そして日本の SX シリーズ上で利用されております。

3. Gaussain94 の機能

ここでは Gaussian94 の機能について概要を紹介する。

3.1 基本アルゴリズム

- 1) 縮約 Gaussian 型関数による一電子・二電子積分計算。基底関数はカーテシアン型あるいは角運動量型関数を用いている。また、豊富な基底関数セットが用意されている。ユーザの指定に従って積分値はメモリあるいは外部装置にストアされるか再計算する。
- 2) 分子軌道関数基底への原子軌道関数(AO)積分変換には四つ方法が提供されている。第一は in-core 型、これは AO 積分値をメモリに置く。第二は direct 型、これは積分値はストアせず必要な度に再計算する。第三は semi-direct 型、これは全てではないが AO 積分値をメモリに置く。第四は conventional 型、これは全 AO 積分値をディスク上に置く。

3.2 エネルギー

- 3) 半経験的計算では CNDO、INDO、MINDO/3、MNDO、AM1、PM3 の各モデル型ハミルトニアンを使っている。
- 4) 自己無撞着場計算では closed-shell、非制限 open-shell(UHF)、制限 open-shell(ROHF)型の Hartree-Fock 波動関数を使う。
- 5) Møller-Plesset 摂動理論による五次までの相関エネルギー計算。メモリとディスクを有効に使うために MP2 計算では direct と semi-direct を用意している。
- 6) 配置間相互作用(CI)、全二重励起(CID)あるいは全一重・二重励起(CISD)による相関エネルギー計算
- 7) 二重置換型 Coupled クラスタ理論(CCD)、一重・二重置換型 Coupled クラスタ理論(CCSd)、一重・二重置換型四重配置間相互作用(QCISD)、Bruecker Double 理論を採用している。QCISD に対する四体励起と同様に直接法三重効果も計算する。
- 8) LSDA、BLYP、Becke's の 1993 3 パラメータハイブリッド法、及び Hartree-Fock と DFT による一般 user-configurable ハイブリッド法を含む密度汎関数法
- 9) 自動化高精度エネルギー法として G1 理論、G2 理論及び G2(MP2)理論を採用している。また、完全基底セット法として一般 CBS 外挿と同様な CBS-4、CBS-q、CBS-Q、及び CBS-APNO を用いている。
- 10) 完全活性空間 SCF(CASSCF)及び MP2 相関を考慮できる一般 MCSCF を採用している。また、アルゴリズムの改良により 10 活性軌道関数まで扱える。
- 9) Generalized Valence Bond-Perfect Pairing(GVB-PP)法
- 10) Hartree-Fock と DFT 法において制約無しでの SCF 波動関数使った安定性のテスト
- 11) 単一励起配位間相互作用による励起状態エネルギー

3.3 勾配、構造の最適化

- 1) RHF、UHF、ROHF、GVBPP、CASSCF、MP2、MP3、MP4(SDQ)、CID、CISD、CCD、QCISD、密度汎関数、励起状態 CIS エネルギー等の解析的構造最適化計算。また、これら全てにおいて Frozen-core 近似を取ることが可能である。
- 2) 内部座標、カーテシアン座標又は混合座標による最小点あるいは鞍点への構造の自動最適化が既定値となっている。入力座標系によらず、冗長

的内部座標により最適化が行なわれる。

3)同期型遷移誘導準ニュートン法による遷移状態の自動検出

4)固有反応座標による反応経路追跡

5)状態平均 CASSCF による Conical intersection 最適化

3.4 振動数、二次微分

1)RHF、UHF、DFT、RMP2、UMP2、CASSCF 手法及び CIS を使った励起状態での力定数(核座標二次微分)の解析計算、偏極性、超偏極性及び解析的な双極子微分計算

2)MP3、MP4(SDQ)、CID、CISD、CCD、QCISD 法での数値的エネルギー微分または勾配による力定数、偏極性と双極子微分計算

3)同位体、温度、圧力による調和振動子解析と熱化学解析

4)振動子遷移による IR とラマン強度の確定

3.5 分子特性

1)Mulliken population 解析、多重双極子モーメント、natural population 解析、静電ポテンシャル、と Merz-Kollman-Singh、Chelp、又は CHelpG 手法を使った静電ポテンシャル的電荷を含む SCF、DFT、MP2、CI、CCD、QCISD 方法による一電子特性の解析

2)SCF と DFT による NMR 遮蔽応力と分子感応性

3)分子中原子の結合解析と原子物性値

4)伝播関数法による電子親和性とイオン化ポテンシャルの計算

5)CASSCF 計算で二つのスピン状態の近似スピン軌道結合力が計算可能

3.6 溶液モデル

以下に述べる三つのモデル全てにおいて自己無撞着反応場(a self-consistent reaction field:SCRF)手法を用いている。

1)Onsager モデル(dipole と sphere) : HF と DFT レベルでは解析的一次微分、二次微分、MP2、CI、CCD、QCISD レベルでは単点エネルギーを含む。

2)PCM(overlapping sphere)と IPCM(static isodensity surface)モデル : HF と DFT レベルではエネルギーを含む。

3)SCI-PCM(self-consistent isodensity surface)モデル : HF と DFT モデル : 解析的エネルギー、勾配と数値的振動数解析を含む。

4. 利用法

4.1 Gaussian を利用するための設定

ここでは環境変数の追加方法について説明する。C シェルの利用を前提とする。以下の設定を .login ファイルで行なう。

```
setenv g94root /usr/local/appli      ←Gaussian の home directory
source $g94root/g94/bsd/g94.login
```

3.2 Gaussian を実行するためのシェル

ここでは実行するためのシェルの例を説明する。

環境変数の設定

F_PROGINF に(Yes/Detail)指定することにより Program Information が得られます。

F_PRINFDIFF を No 指定します。

GAUSS_EXEDIR に Gaussian の実行形式がある directory を指定します。

最後の行で実行します。

入力が test004.com、出力が test004.log になります。

```
#!/bin/csh
#
#  run script for Gaussian
#
#      input  file   : test004.com
#
#      output file   : test0004.log

setenv F_PROGINF      DETAIL
setenv F_PRINFDIFF    NO

setenv GAUSS_EXEDIR   /usr/local/appli/g94

${GAUSS_EXEDIR}/g94 < test004.com >&! test004.log
```

4. 実行例

ここでは Gaussian の実行結果の例を示します。データは入力データの例でもありました Gaussian のテストデータ (test004.com) を使用しました。MFLOPS 値が低いのは計算規模が小さいためです。出力内容については Gaussian の説明書を参照してください。

入力例 : Gaussian のテストデータ test004.com

```
#P TEST UHF/6-31G* scf=conventional
```

```
Gaussian Test Job 04
```

```
6-31G**/6-31G* ETHYL RADICAL
```

```
0,2
```

```
C
```

```
C,1,RCC
```

```
H,1,R1,2,A1
```

```
X,1,1.,2,X1,3,180.,0
```

```
H,1,R2,4,A2,2,90.,0
```

```
H,1,R2,4,A2,2,-90.,0
```

```
H,2,R3,1,A3,3,0.,0
```

```
H,2,R4,1,A4,3,180.,0
```

```
RCC=1.4985
```

```
R1=1.08422
```

```
R2=1.0886
```

```
R3=1.07398
```

```
R4=1.07507
```

```
A1=111.48882
```

```
X1=127.99832
```

```
A2=53.40128
```

```
A3=121.54216
```

```
A4=120.49668
```

出力例 : 一部省略しています。

Gaussian 94: NEC-SX-4-SUPER-UX-G94RevD.3 1-May-1996

12-Oct-1996

#P TEST UHF/6-31G* scf=conventional

1/38=1/1:

2/12=2,17=6,18=5/2;

3/5=1,6=6,7=1,11=2,25=14,30=1/1,2,3,11,14:

4/7=2/1;

5/5=1/2;

6/7=2,8=2,9=2,10=2,19=1,28=1/1;

99/5=1,9=1/99;

Gaussian Test Job 04 6-31G*//6-31G* ETHYL RADICAL

Symbolic Z-matrix:

Charge = 0 Multiplicity = 2

C

C	1	RCC					
H	1	R1	2	A1			
X	1	1	2	X1	3	180.	0
H	1	R2	4	A2	2	90.	0
H	1	R2	4	A2	2	-90.	0
H	2	R3	1	A3	3	0.	0
H	2	R4	1	A4	3	180.	0

Variables:

RCC	1.4985
R1	1.08422
R2	1.0886
R3	1.07398
R4	1.07507
A1	111.48882
X1	127.99832
A2	53.40128
A3	121.54216

Z-MATRIX (ANGSTROMS AND DEGREES)

CD Cent Atom	N1	Length/X	N2	Alpha/Y	N3	Beta/Z	J

1	1	C					
2	2	C	1	1.498500(1)			
3	3	H	1	1.084220(2)	2	111.489(8)	
4		X	1	1.000000(3)	2	127.998(9)	3 180.000(14) 0
5	4	H	1	1.088600(4)	4	53.401(10)	2 90.000(15) 0
6	5	H	1	1.088600(5)	4	53.401(11)	2 -90.000(16) 0
7	6	H	2	1.073980(6)	1	121.542(12)	3 0.000(17) 0
8	7	H	2	1.075070(7)	1	120.497(13)	3 180.000(18) 0

省略

***** Program Information *****

User Time (sec)	:	16.333696
Sys Time (sec)	:	3.668911
Vector Time (sec)	:	0.000344
Inst. Count	:	737756000.
V. Inst. Count	:	4497.
V. Element Count	:	89014.
FLOP Count	:	188316279.
MOPS	:	45.172907
MFLOPS	:	11.529312
VLEN	:	19.794085
V. Op. Ratio (%)	:	0.012064
Memory Size (MB)	:	39.031250
MIPS	:	45.167733
I-Cache (sec)	:	1.378768
O-Cache (sec)	:	1.312507
Bank (sec)	:	0.183135

A MAN THINKING OR WORKING IS ALWAYS ALONE,

LET HIM BE WHERE HE WILL.

-- THOREAU

Job cpu time: 0 days 0 hours 0 minutes 16.3 seconds.

File lengths (MBytes): RWF= 9 Int= 4 D2E= 0 Chk= 1 Scr= 1

Normal termination of Gaussian 94

```
***** Program Information *****
User Time (sec)      :      0.014534
Sys  Time (sec)      :      0.128252
Vector Time (sec)    :      0.000029
Inst. Count          :      1068108.
V. Inst. Count       :           443.
V. Element Count     :           7266.
FLOP Count           :           216.
MOPS                  :      73.957470
MFLOPS                :      0.014861
VLEN                  :      16.401806
V. Op. Ratio (%)     :      0.675950
Memory Size (MB)     :      6.031250
MIPS                  :      73.488033
I-Cache (sec)        :      0.001754
O-Cache (sec)        :      0.000473
Bank (sec)           :      0.000000
```

5. おわりに

本章では Gaussian についての概要と実行するための最小限の説明をしました。Gaussian についての詳細は説明書を参照ください。実行環境等あるいは SX システム上の Gaussian に対しまして質問等がございましたら担当 SE の方までお問い合わせください。

今後も最新の Gaussian シリーズをサポートしてまいりますので宜しくお願い致します。