The University of Osaka
Institutional Knowledge Archive

Title	分子軌道計算プログラム,GAUSSIAN94の速度と計算結果の可視化
Author(s)	高木, 達也
Citation	大阪大学大型計算機センターニュース. 1999, 112, p. 101-106
Version Type	VoR
URL	https://hdl.handle.net/11094/66335
rights	
Note	

The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA

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

The University of Osaka

分子軌道計算プログラム、GAUSSIAN94 の速度と計算結果の可視化

大阪大学大学院薬学研究科　高木達也

§１．はじめに

昨年度のＳＸ－４モニター計画において、NEC 製の分子軌道計算プログラム、AMOSS[1]の速度計測と、計算結果の可視化について報告を行った。その結果、AMOSS が超高速プログラムであり、少なくとも速度に関しては、GAUSSIAN を遙かに凌駕することが判明した。しかし、もちろん、その多様な機能ゆえ、GAUSSIAN の需要はきわめて大きい。今回は、主として GAUSSIAN94[2]の簡便な使用法と、計算結果の可視化を焦点にして、様々な検討を試みたので、以下報告する。

§２．プリポストプロセッサーの使用

Gaussian は最近、Gaussian98 が発売され、ONIOM 等、新しい機能が追加されたが、以下で述べるのは、現在センターで利用可能な Gaussian94[2]に限定する。

１）ISIS Draw[3]、MOLDA[4]の利用

ISIS Draw[3] は、MDL Information Systems 社の製品で、学術用、個人用には無料で配布されている。元来は、化学構造式を書くためのソフトで、Gaussian とのインターフェースを有しているわけではないが、3D 化して mol ファイルとして書き出すことが可能なため、後述の MOLDA[3]と併せて用いれば、大変便利である。[Chemistry]-[3D]-[Create]で 3D 化すると、対称性のある分子では対称面等が表示される。なお、この状態から mol ファイルを書き出すには、当該分子を Lasso Select で選択する必要がある。

MOLDA[4] は、広島大学の吉田らによって作成された、Windows マシン用のソフトで、Gaussian94 以外にも、MOPAC,MM2,AMBER とのインターフェースを持っている。世界中の類似のソフトを比較したわけではないので,絶対的な判断は私には不可能だが,この種のフリーウェアソフトとしては大変優れたものの 1 つであることは間違いない。間もなく解説書が出版されるとも伺っているし,インストールはきわめて簡単なので省略する。

もちろん、MOLDA は独自のモデリング機能を有しているので、さらに複雑な分子も容易に構築できる。図 1 は、Ni(II)のエチレンジアミンキレート錯体の例で（VRML として出力したものをブラウザで表示している)、このように構築できれば、後は Gaussian や MOPAC のフォーマットに変換し、入力ファイルを書き出すことができる。ポストプロセッサーとしても、Gaussian の log ファイルを Import することができるので、最適化された結果を表示することができる。それだけでなく、先述のように分子モデルを VRML ファイルとして出力することも可能なので、WWW 上での計算結果の公開等にも有用である（図１）。

２）MolStudio[5]、Mol Molis[6]の利用

ISIS Draw, MOLDA がプリプロセッサーとしての性格が強いのに対し、MolStudio[5]、Mol Molis[6]

は、ポストプロセッサーとしての利用に強みを持っている。MolStudio は、SX に nqs ジョブを投入することも可能なので、プリプロセッサーとしても強力であるが、私個人は、ISIS Draw、MOLDA をプリプロセッサーとして、MolStudio、Mol Molis をポストプロセッサーとして使い分けている（この辺は好みの範疇にはいるので、もちろん、異論のある方もおられるだろう）。

ポストプロセッサーの必要条件は、波動関数の等値曲面と電子密度分布の等値曲面が描けることであるが、MolStudio と Mol Molis は双方ともこの条件を備えている。ではどこが異なるのかといえば、MolStudio が Windows マシン上で動作する廉価なソフトウェアであるのに対し、Mol Molis は、UNIX マシン上で動作するソフトで他にも多くの機能を有しており、センターに直接こられた場合に利用可能になっている点であろう。以下では、Mol Molis の利用法を概説してみる。さて、例として、分子軌道の等値曲面を描く場合を挙げてみる。おおよそのところ、

i) あらかじめ GAUSSIAN94 で計算を終えておく。この時、Gfprint, POP=Full のオプションを指定しておく。

ii) センターのグラフィック処理室に来ていただく。

iii) で、Indigo2 (ccindigo01)の前に座り、ログインする。

iv) UNIX shell を起動する。

v) コマンド名 molis と投入すると、Mol Molis が起動する。

vi) 画面右側がメニューになっているので、一番上の「File」をクリックし、現れるメニューの中から、GAUSSIAN をクリックする。

vii) 中央付近に現れるディレクトリの記述の部分をクリックし、下に現れる入力エリアに、GAUSSIAN の log ファイルが格納されているディレクトリを指定する。

viii) 拡張子が log であるファイルは、一覧に表示されるので、その中から、可視化したいデータが格納されているファイルを指定する。

ix) log ファイルが正常に読まれると、分子構造のワイヤーモデルが表示される。

x) 次に、右上のメニューの「Interface」をクリックし、現れるメニューの中から「CALGRD」を選択してクリックする。

xi) すると、どの分子軌道をどのディレクトリのどのファイルへ格納するか等を入力する表示に変化する。とりあえずは、ディレクトリとファイル名と、MO の番号（エネルギーが最も安定なものが 1 となっている）だけを指定してみればいいと思われる。結果がうまくなければ、再度、グリッド間隔などを調整する。

xii) GO ボタンをクリックすると、格子点上の分子軌道関数の値の計算が始まり、しばらくすると、完了した旨、表示されるので、ok ボタンをクリックすると、元のメニューに戻る。

xiii) 今度は、右上のメニューから「Orbital」を選択し、3D-shading、Read File を選択する。

xiv) 再びディレクトリとファイルの選択場面になるので、同様にディレクトリを入力する。CALGRD が正常に修了していれば拡張子.shl のファイルがメニューに現れるので、選択する。

xv) そうすると、分子軌道の等値曲面が描画される（図2)。

という順序で行えばいい。図2に、Mol Molis で描画した、Ni(II)のエチレンジアミンキレート錯体の分子軌道（３５番目）等値曲面の図を示した。他の機能も、メニュー画面から容易に実行することができる。研究室等からでは、先述のように、パーソナルコンピュータ上で、MolStudio か、Win MOPAC[7] を用いることもできる（図３)。この場合、SX 上で先に、formchk コマンドにより、chk ファイルを ASCII 形式（.fchk, .fch）に変化させておく必要がある。ユーザーは、このファイル(.fchk)を、FTP 等で引っ張ってくればいい。

なお、この他にも GAUSSIAN には多くのプリポストプロセッサーが存在し，甲乙つけがたい性能等を有している。今回取り上げたのは，筆者が容易に利用できたものに限られており，評価の結果でないことをご確認願います。

§３．計算速度の各種マシンによる比較。

昨年度のモニター報告で触れたように、AMOSS との速度比較では、GAUSSIAN は残念ながら、桁違いに遅いと言わざるを得ない。並列化ができていないためであることも大きな理由だが、それだけではないだろう。しかし、density function 法など、GAUSSIAN でなければ実現できない機能も少なくないため、GAUSSIAN の並列化、ベクトル化が望まれるところである。

さて、SX-4 での GAUSSIAN の速度はどの程度の実力を持っているのか、試してみた。計算した分子は $SO_2(CH_3)_2$ で、基底関数は 6-31G**、B3LYP で構造最適化計算を行った。SX-4 と Exemplar での計算は、大阪大学大型計算機センターで行っている。もちろん、GAUSSIAN の revision も異なるし、メモリーその他の条件も異なるので単純に比較できないが、いずれにしろ、SX-4 がそれほど高速というわけではないことは確かなようである。恐らく、ほとんどのケースにおいて、Exemplar を利用された方が、料金的にはお得であろう。

表　GAUSSIAN94 の種々のマシンによる速度比較。

使用マシン	SX-4	Exemplar	SGI Octane R10000	SGI O2 R10000	SGI O2 R5000
Revision 等	NEC-SX-3-SUPER-UX-G94RevD.4	HP-PARisc-HPUX-G94RevE.2	SGI-G94RevB.3	SGI-G94RevB.3	SGI-G94RevB.3
計算時間	18' 39"	22' 08"	51' 12"	110' 45"	255' 40"

§４．謝辞

最後になりましたが、本モニター計画をお認め頂きました、大阪大学大型計算機センターライブラリプログラム研究開発計画委員会に深謝いたします。また、計算を進めるに当たって、種々ご指導いただきました、大阪大学大型計算機センター職員の皆様に深謝いたします。

更に、MolStudio のプレリリース版の試用をお認め頂きました、NEC 汎用アプリケーション事業部の皆様に深謝いたします。

最後の最後になってしまって大変恐縮ですが、MOLDA の開発を続行しておられる吉田弘先生らのグループのような、ほとんどボランティアに近い方々のご努力が、今日の情報化学（情報科学と言ってもいいかもしれない）を支えていると言っても過言ではないように思われます。ただただ驚き、感謝するばかりであることを付け加えさせて頂きたいと思います。

§参照

1) 日本電気株式会社の製品、*http://www.sw.nec.co.jp/APSOFT/SX/amoss/index.html*

2) **A**: Gaussian 94, Revision B.3, M. J. Frisch, G. W. Trucks, H. B. Schlegel, P. M. W. Gill, B. G. Johnson, M. A. Robb, J. R. Cheeseman, T. Keith, G. A. Petersson, J. A. Montgomery, K. Raghavachari, M. A. Al-Laham, V. G. Zakrzewski, J. V. Ortiz, J. B. Foresman, C. Y. Peng, P. Y. Ayala, W. Chen, M. W. Wong, J. L. Andres, E. S. Replogle, R. Gomperts, R. L. Martin, D. J. Fox, J. S. Binkley, D. J. Defrees, J. Baker, J. P. Stewart, M. Head-Gordon, C. Gonzalez, and J. A. Pople, Gaussian, Inc., Pittsburgh PA, 1995. **B**: Gaussian 94, Revision D.4, M. J. Frisch, G. W. Trucks, H. B. Schlegel, P. M. W. Gill, B. G. Johnson, M. A. Robb, J. R. Cheeseman, T. Keith, G. A. Petersson, J. A. Montgomery, K. Raghavachari, M. A. Al-Laham, V. G. Zakrzewski, J. V. Ortiz, J. B. Foresman, J. Cioslowski, B. B. Stefanov, A. Nanayakkara, M. Challacombe, C. Y. Peng, P. Y. Ayala, W. Chen, M. W. Wong, J. L. Andres, E. S. Replogle, R. Gomperts, R. L. Martin, D. J. Fox, J. S. Binkley, D. J. Defrees, J. Baker, J. P. Stewart, M. Head-Gordon, C. Gonzalez, and J. A. Pople, Gaussian, Inc., Pittsburgh PA, 1995. **C**: Gaussian 94, Revision E.2, M. J. Frisch, G. W. Trucks, H. B. Schlegel, P. M. W. Gill, B. G. Johnson, M. A. Robb, J. R. Cheeseman, T. Keith, G. A. Petersson, J. A. Montgomery, K. Raghavachari, M. A. Al-Laham, V. G. Zakrzewski, J. V. Ortiz, J. B. Foresman, J. Cioslowski, B. B. Stefanov, A. Nanayakkara, M. Challacombe, C. Y. Peng, P. Y. Ayala, W. Chen, M. W. Wong, J. L. Andres, E. S. Replogle, R. Gomperts, R. L. Martin, D. J. Fox, J. S. Binkley, D. J. Defrees, J. Baker, J. P. Stewart, M. Head-Gordon, C. Gonzalez, and J. A. Pople, Gaussian, Inc., Pittsburgh PA, 1995.; *http://www.gaussian.com/*

3) MDL Information Systems, Inc. の製品。*http://www.mdli.com/download/index.html*

4) Yoshida, H.; Matsuura, H., J. Chem. Soft., 3, 157-164 (1997).: *http://cssj.chem.sci.hiroshima-u.ac.jp/molda/molda.htm*

5) 日本電気株式会社の製品。間もなく R2.0 が販売されるとのことだが、今回使用したのは、R1.0 の評価版であることをお断りしておく。*http://www.sw.nec.co.jp/APSOFT/SX/molstudio/index.html*

6) ダイキン工業株式会社の製品。http://www.comtec.daikin.co.jp/ccs/CCS-4-1.html

7) 富士通株式会社の製品。Version 2.01 を使用。http://www.fqs.co.jp/CCS/MOPAC/

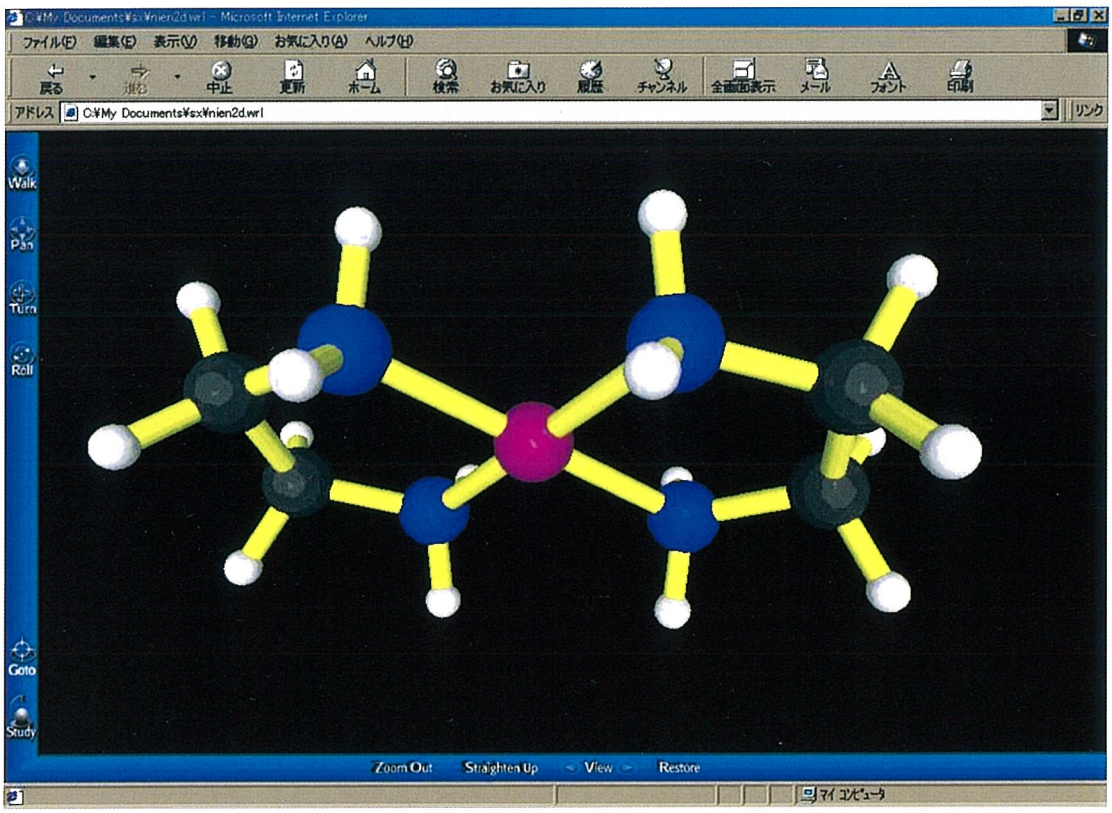


図１　MOLDA[4)]で作成された VRML ファイルの表示例

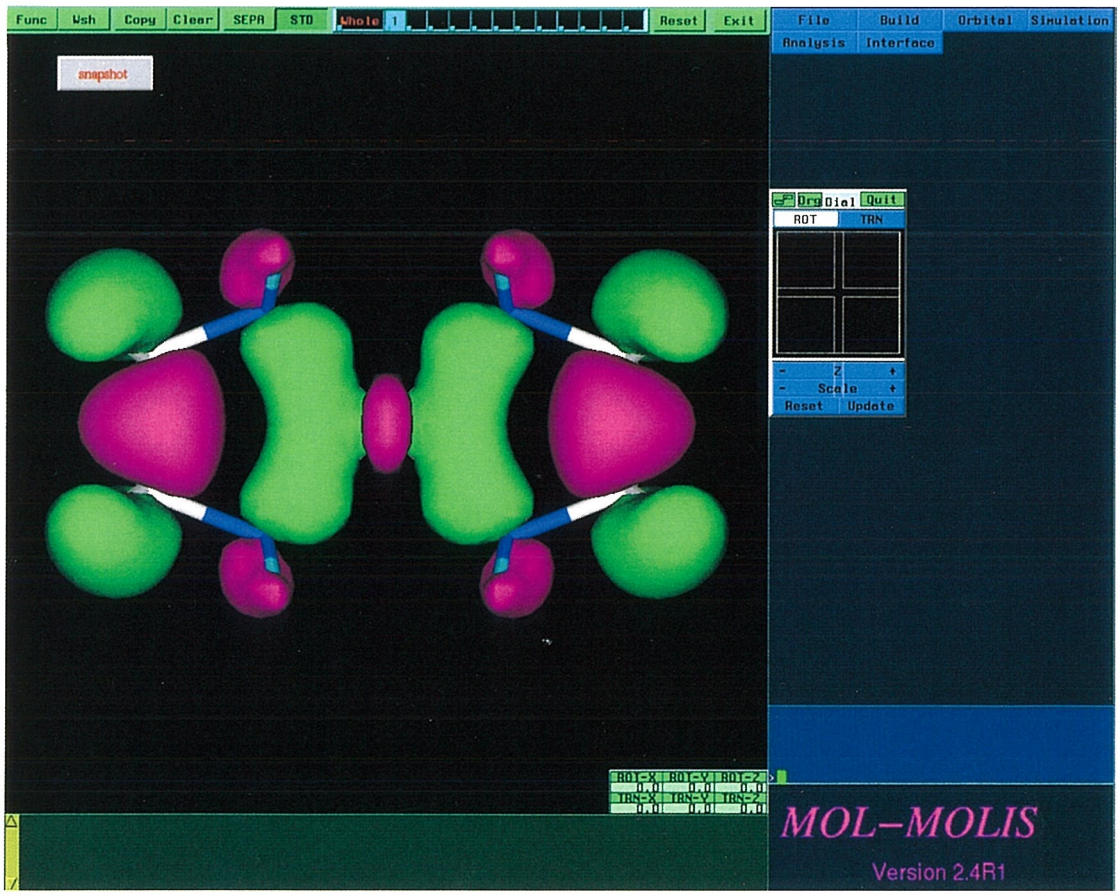
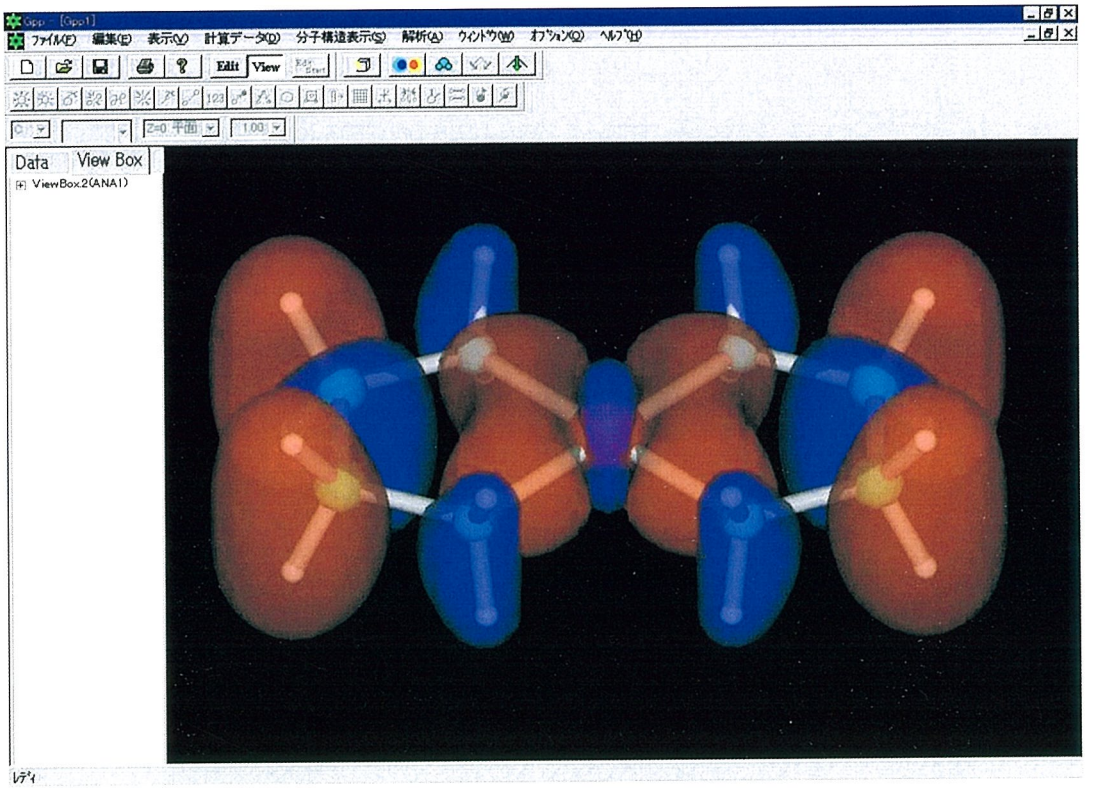


図２　Mol Molis[6)] による [Ni(en)2]2+の 35 番 MO の等値曲面



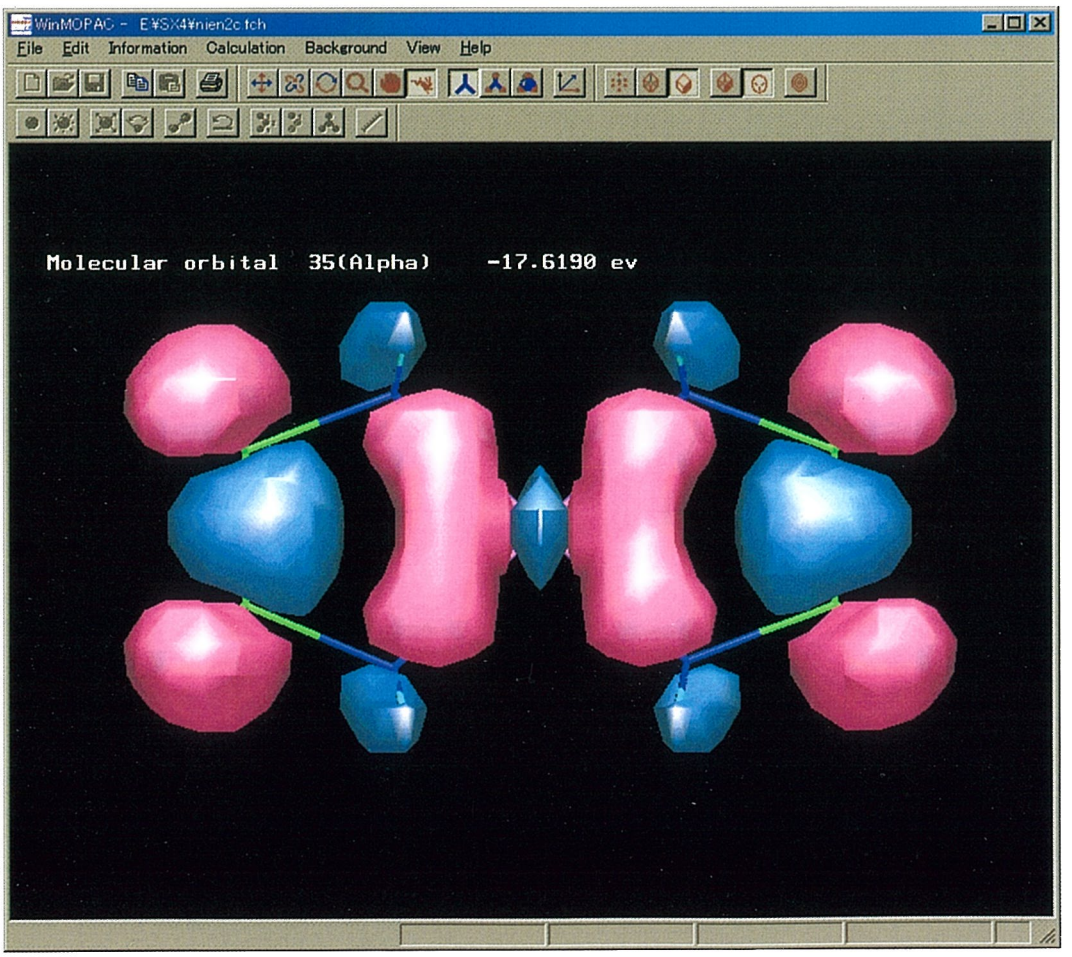


図３　MolStudio[5]（上）　及び Win MOPAC[7]（下）　による分子軌道の等値曲面