

[報 告] 計算科学・計算機科学人材育成のためのスーパーコンピュータ無償提供利用報告

理学部化学科での計算化学演習

— 物理化学演習 B の Gaussian 実習 —

森田明弘

東北大学大学院理学研究科化学専攻

東北大学理学部化学科では、本サイバーサイエンスセンターの「計算科学・計算機科学人材育成のためのスーパーコンピュータ無償提供」の制度を利用して、3年生を対象として物理化学演習 B が実施されている。この演習（担当：森田明弘教授）は、前期セメスター（5セメスター）の水曜日1限に開講され、化学科3年生の半数程度の学生が受講した。本演習は、物理化学系の学部向け講義の一環として、群論および量子化学の理解を深めることを目的としている。セメスターの前半に群論の演習、後半に量子化学の演習を行い、その量子化学の演習では本センターの並列コンピュータ LX406Re-2 上にインストールされた Gaussian 16 プログラムを利用した。

群論と量子化学は、化学科の学生が学ぶ物理化学の中でも特に演習が必要なテーマである。群論は化学系の学生にとって分子や結晶の対称性を考える基礎知識であり、軌道対称性が支配する化学反応の機構、分光学の解釈、結晶構造解析など化学の広い範囲にわたって必要となる。しかし化学の学生にとっては、数学的な体系を講義するだけでは十分な理解が身に着くとはいえず、実際に学生自ら手を動かして対称性の感覚を分かるようにならないと、今後の研究で使いものにならない。そのためには、演習問題をこなす機会を用意することが有効である。

量子化学も同様であり、近年の計算機の進歩に伴って、量子化学計算は一部の理論化学者だけのものではなく、汎用的な“計測機器”として実験化学者にも日常的に用いられる手法となっている。量子化学を実際の研究に役立てるためには、電子状態の理論を学ぶだけでは十分でなく、実際に計算機を使って計算してみて、その結果を自分で吟味することが不可欠である。

この演習は群論および量子化学の講義を兼ねて行われた。毎回化学科の講義室にて演習で扱う内容をまとめた講義を行い、それに関連する演習問題を宿題とする。学生は各自次回の演習までに、それを解いてレポートをまとめて提出する。次回の演習の初めには、その解答を解説して質問を受け付ける。成績は、提出されたレポートをもとにして評価する。後半の量子化学の演習では、各回のテーマに応じた量子化学計算の問題を出し、学生は Gaussian の入力ファイルを作成してジョブを実行し、その結果を見て解釈することが課題になる。

Gaussian の実行にあたっては、本センターより学生のための教育用アカウントを発行していただき、Gaussian 実行環境を用意した。化学科の教室にも Windows PC を備えた端末室があり、学生はそこで Windows 版の Gaussian を使用することもできる。しかし化学科の端末室は主に学生実験のためのもので、計算機演習を行うには台数も資源も十分でなく、Gaussian の計算環境を別途用意することが本演習にとって必要であった。学生は自宅からインターネット経由でサイバーサイエンスセンターの計算機にアクセスすることができ、演習問題を自宅で勉強することもできるようになった。

以下では、サイバーサイエンスセンターの利用に関わる量子化学演習の内容を簡単に紹介する。その部分の構成は以下の通りである。

量子化学演習（後半）

1. Schrödinger 方程式と電子状態理論の精度
2. 分子内座標、原子単位
3. 基底関数
4. 構造最適化と振動計算
5. 開殻系の波動関数、電子相関
6. Gaussian の実用的な使い方、分子間力、分子内の電荷分布
7. 溶液内の分子、励起状態

量子化学計算は、分子内の電子に関する Schrödinger 方程式の近似解を求めるものであり、長い研究の歴史のなかで、その精度や妥当性に関して多くの知見が蓄積している。精度を無視した計算結果は無意味であり、本演習の第一の目的として、自分が扱いたい分子や物性量を実際に計算してみて、ユーザーの立場からみてその精度を実感してもらうことに置いた。良い結果を得るためには、適切な電子状態理論の手法と基底関数の両方を選ぶことが必要であり、それぞれ実例をもって納得してもらう。

たとえば基底関数について例をあげると、基底関数には最小基底、double zeta、triple zeta という精度の系列があり、さらに分極関数や diffuse 関数が適切に加えられる必要がある。よく知られた例では、アンモニア NH_3 分子の構造を記述するには分極関数が不可欠であること、アニオンの電子状態を描くには広がった基底関数が必要であることなど、実例をあげて演習する。また開殻系や励起状態など、電子状態の特徴をふまえて計算する必要がある場合も学習した。構造最適化や振動数計算、Gaussian の多段ジョブなど、実用的にも役に立つ計算手法も、なるべく紹介するようにした。

一般に精度の高い計算を実行するには大きな計算資源が必要であり、実際の電子状態計算は、精度と計算資源のバランスの中で行われる。本演習のなかでも、可能なかぎり良い精度での計算を学生に体験してもらうためには、本サイバーサイエンスセンターの計算資源の提供は大変有意義であった。

謝辞

本演習は、東北大学サイバーサイエンスセンターのスーパーコンピュータを利用することで実現することができた。また、研究にあたっては同センター関係各位に有益なご指導とご協力をいただいた。