

[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制度

## 全学教育・基礎ゼミ 分子の不思議 I コンピュータを使った分子の計算演習の実施報告

岸本 直樹

東北大学大学院理学研究科化学専攻

2021年4月26日から5月24日までの4週間、全学教育・基礎ゼミ「分子の不思議 I」の一部として、1年生14人を対象に量子化学計算演習を実施しました。この4回は、サイバーサイエンスセンターの実習室でコンピュータを使って分子の世界を研究する方法の最前線を経験することを目的としました。

4回は以下の構成で、各自がWindows PCでGaussian社のソフトウェアを使って演習に取り組みました。

1. GaussViewで分子モデルを作る (+ サイバーサイエンスセンター紹介)
2. Gaussian16Wを用いた分子構造の計算と振動スペクトル
3. Gaussian16Wを用いた化学反応の計算
4. Gaussian16Wを用いた溶液中の構造と励起状態の計算

GaussViewは量子化学計算ソフトウェアGaussian専用の可視化ソフトウェアで、Windows上で分子のモデルを作成しGaussian16Wを実行させることができます。大学に入学して2ヶ月も経たない学生に量子論から講義することは難しいと判断して、二酸化炭素の振動と温暖化問題、分子の異性化反応、水中のアミノ酸の構造変化など、高校化学の知識程度で理解できる内容を探しました。また、毎回の演習内容はGoogle Classroomを通じてPDFファイルを事前に配布し、授業時間内は教員とTAの2名で技術的問題に対応しました。

4回の演習を終了した後で受講生に感想を提出してもらいましたが、高校では暗記科目だった化学の内容や分子の構造を改めて理解することができたという感想が多く、概ね好評でした。扱った内容は、授業時間内に終わる程度の近似を使った計算に過ぎませんが、コンピュータを使った分子レベルの解析や説明が今後ますます重要性を増していくであろうことを1年生に感じてもらうことができたと自負しております。なお、筆者はサイバーサイエンスセンターの利用者講習会(Gaussian入門)を担当しており、様々な若手研究者に量子化学計算を教えておりますが、現在では化学のみならず物質科学の広範な研究分野で量子化学計算が必要とされていることを感じております。

本ゼミの開催に当たっては、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制度」を活用させていただきました。新型コロナウイルス感染拡大防止対策も含めて、関係各位に大変お世話になりました。厚く御礼申し上げます。