

[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〉

大学院講義・先進化学国際講義 I (GP-Chem) における 量子化学演習の実施報告

岸本 直樹

東北大学大学院理学研究科化学専攻

2023年1月4日から30日までの間に、大学院講義「先進化学国際講義 I (GP-Chem)」の一環として量子化学演習を、大学院生9人を対象に実施しました。この演習では、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た量子化学計算を経験することで、各自の化学研究に活用できるようになることと、広い視野に立った若手研究者の育成を目的としました。今回、大学院生は計3回の演習に参加する必要がありましたが、センターの実習室を6回分の時間(9時間)お借りして各人の予定に対応しました。

3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。以前に東北大学1年生の基礎ゼミで用意した内容を高度化し、基礎理論をレポート課題として加えています。

1. GaussViewで分子モデルを作り、Gaussian16Wを用いて構造の最適化(安定化)を行う。
2. Gaussian16Wを用いて気相あるいは水溶液中で安定な分子の構造と振動スペクトルを計算する。
3. Gaussian16Wを用いて分子の反応の経路や励起状態を計算する。また分子が持つ電子の密度を図で表現する。

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。温暖化問題に関係した二酸化炭素の振動、水中でのアミノ酸の構造変化、小分子の異性化反応、多環芳香族分子の励起状態などの内容を課題として、毎回の演習内容を各人にPDFファイルで配布することで感染対策を取りながら、教員とTAで質問に対応しました。また一般に分子の計算は電子数に応じて処理時間が掛かるようになるため、授業時間内で終了できる近似手法を用いました。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)を担当しておりますが、広範な研究分野で分子の量子化学計算が必要とされていることを実感しておりますので、今回のような取り組みは大変重要であると思います。

本演習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。関係各位に大変お世話になり、厚く御礼申し上げます。