

## [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〉

## 東北大学統合化学国際共同大学院 (GP-Chem) 先進化学国際講義 I における 量子化学実習

菅野 学

東北大学大学院理学研究科化学専攻

東北大学統合化学国際共同大学院 (GP-Chem) は、化学の多様な分野を統合した研究・教育を行うことを目的として 2022 年 4 月に設置されました。理学・工学・薬学・農学・情報科学・生命科学・環境科学の 7 研究科に所属する大学院生から選抜し、化学およびその学際領域を幅広くカバーする分野融合型の教育プログラムや、国際的なリーダーシップを養うためのメニューを通して、最先端の学術研究を牽引し国際的に活躍できる人材の育成を目指しています。

先進化学国際講義 I は、化学の未探究領域における最新の進歩を紹介するコースであり、その一環として量子化学実習を開講しました。近年の理論の発展、コンピューターの性能向上、使いやすいソフトウェアの開発などによって、量子化学計算は生命・創薬・材料などを含むあらゆる分野で活用されています。普段は量子化学計算に接する機会の少ない大学院生がその基礎を学ぶことで、各自の研究に役立てるだけでなく、俯瞰的視野と実践力を養うための実習です。

2024 年 1 月 16 日 (火) と 18 日 (木) にサイバーサイエンスセンターの端末機室を 3 講時から 5 講時までの時間 (13:00 ~ 17:50) お借りし、留学生を含む受講生 11 名を 2 つのグループ (16 日は 5 名、18 日は 6 名) に振り分けて同じ内容の実習を英語で行いました。Windows 端末にインストールされた Gaussian 社の量子化学計算ソフトウェア Gaussian 16 およびそれ専用の可視化ソフトウェア GaussView 6 を使用し、受講生各自が以下の課題に取り組みました。

1. 分子モデル (初期構造) の作成とそれを始点とした分子構造の最適化 (安定構造の探索)
2. 分子の基準振動解析 (赤外吸収スペクトル計算)
3. 溶媒効果の考慮
4. 分子軌道や電子密度などの可視化
5. 化学反応経路の探索 (遷移状態計算)
6. 電子励起状態の評価 (紫外・可視吸収スペクトル計算)

Gaussian 16 は世界で最も広く使われている量子化学計算ソフトウェアであり、それを GaussView 6 から呼び出すことにより、Windows 上の簡単なマウス操作で計算を実行できます。当日の実習は Gaussian 16 と GaussView 6 の実践的な操作法の習得に重点を置き、量子化学の基礎理論に関しては受講生自身が文献等を調査して学習するレポート課題として加えました。

筆者は 2020 年度からサイバーサイエンスセンターのテクニカルアシスタント (Gaussian 担当) を務めており、主に実験研究を専門としている学生から届いた量子化学計算の初歩に関する質問に答えることが多くあります。実験研究者にも量子化学計算の重要性が認知されていることを実感しつつ、習得の機会が少ないことも事実と思います。本実習のような取り組みが、その解決の一助となることを願っております。

本実習は、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」の支援を受けて実施させていただきました。関係者の皆様に深く感謝いたします。