大阪公立大学
Osaka Metropolitan University
学術情報リポジトリ

Gaussian98を快適に利用する

メタデータ	言語: Japanese 出版者: 公開日: 2018-09-19 キーワード (Ja): キーワード (En): 作成者: 麻田, 俊雄, 平尾, 和之 メールアドレス: 所属:
URL	http://hdl.handle.net/10466/16058

Gaussian98を快適に利用する

（総合科学部・物質科学科）麻田俊雄、平尾和之

1. はじめに

世界的に見れば、HONDO,MOLPRO,GAMESS など数多くの分子軌道計算プログラムが存在する。しかしながら、理論化学者と実験化学者が現在、最も幅広く利用しているものと言えばGaussian98であろう。Gaussian98は、ノーベル化学賞を受賞したJ.A.Popleの研究グループが中心となって開発した分子軌道計算プログラムで、分子のエネルギー・安定構造・遷移状態の構造・基準振動数・電荷分布など分子の構造および電子状態についての詳細な情報を計算してくれるプログラムである。ユーザーは、いとも簡単な入力データを作成するだけでいい。すでに「情報」第5号の中でもGaussian98の利用法について紹介されている[1]が、ここでは経験的なパラメータを一切含まないab initio分子軌道法を研究により快適に活かすためのノウハウを紹介する。

2. ab initio 計算の様々な近似レベルについて

電子状態の計算を行う上でシュレーディンガー方程式を厳密に解くことは現在のところ不可能であり、ab initio 分子軌道法といっても、事実上いくつかの近似を用いている。例えば、よく用いられる電子相関を含まない計算としては、

・RHF法
・UHF法
・ROHF法

電子相関を含む計算として、

・CISD法
・MP2法
・CASSCF法
・各種DFT法

などがある。電子相関を含まない計算は、電子相関を含む計算と比べると圧倒的に計算時間が短くてすむために、計算のレベルの使い分けを行うことが重要であるといえる。最後に示した密度汎関数法(DFT法)は、従来の分子軌道法とは根本的に異なるが電子相関を含めた計算を行う目的で、近年よく用いられている。これは電子相関を有効的に取り入れ、実測値に近い値を出すことができるうえ、他の分子軌道法による電子相関を取り込んだ計算よりも短時間で結果が得られるために大きな分子などで用いられやすい。しかしながら、DFT法は厳密には分散力を評価することができないので利用するにあたって注意が必要である。

我々の場合、主に分子集合体を研究対象としているため、RHF,UHF,MP2法を用いることが多い。RHFとUHFは、前者が閉殻系に適した計算（α軌道とβ軌道が空間的に同じ領域を占めるように制限している）、後者が開殻系に適した計算方法であることが大きな違いである。

また、用いる基底関数も計算精度を高める上で重要な要素である。基底関数としては

・STO-3G
・3-21G

・6-31+G*
・6-311++G**
などがある。下になるほど高い計算精度が得られる反面、計算時間が長くなる欠点を伴う。すなわち小さな基底関数を用いれば、出てくる結果の信頼性が低下するために適当なものを選択する必要が出てくる。我々の経験からは分子間相互作用を計算する場合、最低でも 6-31+G*が必要であることがわかっている。
実際の計算例として、水分子の入力データを示す。ここでは、基底関数に 6-31+G*、計算レベルは RHF 法を用いて与えた構造の分子軌道計算を行う一点計算の例を示した。

```
---------- ここから ----------
# RHF/6-31+G*

H2O molecule

0 1
O
H1 O 0.9572
H2 O 0.9572 H1 104.52

---------- ここまで ----------
```

一点計算以外に構造最適化ならば Opt、振動数解析ならば Freq を 1 行目の最後に書き加えればよい。

2. Gaussian98 を用いるための手続き

2-1 初期設定

「なみはや」では、各ユーザーのログインシェルがCシェルになっているので各ユーザーのホームディレクトリに .cshrc という隠れファイルが存在する。「なみはや」の Gaussian98 を利用するには予め次の設定を行なっておく必要がある。以下の説明ではプロンプトを namihaya>とする。

i）.cshrc ファイルを編集する。このファイルはログイン時に読み込まれるので一度編集しておくと次回からそのまま利用できる。ログインしたホームディレクトリ上で.cshrc ファイルを vi や mule などのエディタで開き、次の 4 行を書き加える。右はコメントなので書かない。

```
set path=( $path /opt/GAUSSIAN98/g98 )          …パスの設定
setenv g98root /opt/GAUSSIAN98                  …Gaussian98 ルートの指定
setenv GAUSS_EXEDIR /opt/GAUSSIAN98/g98         …実行ディレクトリの指定
setenv GAUSS_SCRDIR /xtmp/$USER/g98scr          …スクラッチディレクトリ指定
```

保存した後、編集内容を直ちに有効とするため

```
namihaya> source .cshrc
```

とタイプする。

ii）スクラッチディレクトリの作成：Gaussian98 で分子の計算をさせると目的とする出力ファ

イル以外に膨大な大きさの中間データ（ *.rwf, *.chk 等からなるスクラッチファイル）が作成される。これらのファイルを置く場所がスクラッチディレクトリである。総合情報センターの「なみはや」ではスクラッチ用に/xtmp という領域が利用可能になっている。そこで、次のコマンドをタイプしてスクラッチディレクトリを作成する。

```
namihaya> mkdir -p /xtmp/$USER/g98scr
```

-p オプションは親ディレクトリを含めて指定したディレクトリを作成するためにつける。スクラッチディレクトリが作成されていることを確認するため、

```
namihaya> ls /xtmp/$USER
```

とタイプする。g98scr ディレクトリが表示されればよい。

2-2 ジョブの投入

「なみはや」でジョブを投入する方法についての詳細は **http://www.center.osakafu-u.ac.jp/server-sys/index.html** を参照してほしい。以下で簡単に紹介する。

```
namihaya> bsub -q Qa 'g98 < h2.dat > h2.out'      ……(A)
namihaya> bsub -q Qa test.bat                     ……(B)
```

(A)ではジョブを Qa というクラスに投入している。依頼内容はシングルクォーテーションで挟んだ形をとる。ここでは入力ファイル名を h2.dat、出力ファイル名を h2.out としている。
一方(B)はバッチファイルにして依頼する方法である。通常 Gaussian98 では複数のジョブデータを入力ファイルに--Link1--で続けて書けば逐次計算を行ってくれる [1]。しかしながら、この場合出力ファイルは１つにまとめて書き出されるため、複数の計算結果がつながっていて見づらくなる。ここでバッチファイルを用いると各出力結果が別々のファイルに書き出されるので整理しやすくなる。次に例をあげておく。

```
namihaya> cat test.bat
g98 < h2.dat > h2.out
g98 < h2o.dat > h2o.out
g98 < ch3oh.dat > ch3oh.out
```

バッチファイルには、このようにジョブ依頼の内容が各行に１つづつ書かれている。注意しておく点として、test.bat には必ず実行権限を与えておかなかればならない。

```
namihaya> chmod +x test.bat
```

とタイプすれば実行権限を与えられる。

2-3 ジョブの監視

Gaussian98 を利用する上で必要と思われるいくつかの端末用コマンドを紹介する。詳細は先にあげた URL に記載されているので参照されたい。

bsub　：ジョブ依頼するコマンド。
bjobs　：実行中のジョブの状態を表示。-a オプションで全てのジョブ情報を表示。
　　このとき JOBID も表示されている。
bqueues：ジョブのキュー情報を表示
bkill　：ジョブを中止するコマンド。bkill *JOBID* で使用

3. 計算結果の処理

Gaussian98 を用いた分子軌道計算が完了すると、通常巨大な出力ファイルが作成される。研究に活かす上でこれらを処理しなければならないが、ごく簡単な分子を除けば膨大なデータを手で処理することは大変困難であるし、ミスをおかす可能性がある。ここでは、結果を視覚的に表示するためのフリーソフト molden を紹介する。

molden とは molecular density をディスプレイに映し出すためのパッケージで、GAMESS や Gaussian に対応しており、アウトプットファイルから必要な情報を読むことができるフリーソフトである。**http://www.caos.kun.nl/~schaft/molden/molden.html** からダウンロードできる。現在、Silicon Graphics IRIX, SunOS と Solaris, Dec ULTRIX, Dec/alpha OSF, CRAY UNICOS, DEC/VMS 5.5, IBM/RS6000 AIX, Linux, HP HP-UX, VAX/VMS, OprnVMS, WindowsNT/95, OS2 の上で動作確認がなされているので、ほとんどのマシンは問題なく動作させることができる。
ここでは、分子軌道を描く方法を紹介する。

3-1 入力データの変更点

molden を使うためには、通常の入力データのルートセクションに pop=full gfinput iop(6/7=3) を追加する必要がある。

例) ---------- ここから ----------

```
#p rhf/sto-3g opt pop=full gfinput iop(6/7=3)

h2o test

0 1
O
H1 O R1
H2 O R2 H1 A1

R1=0.972
R2=0.972
A1=106.00
```

---------- ここまで ----------

3-2 分子を表示させる

まずダウンロードした molden を起動させる。ここでは linux 用 molden の利用例を説明する。Molden が起動したら、図 1 の右に示したコントロールボックスが現れるから、Miscellaneous: の read ボタンをクリックし、計算で得られた出力ファイルを読み込む。読み終わると、図 1 の左に示したような分子の構造が表示される。

3-3 分子軌道を表示させる

Draw Mode: のsolidボタンをクリックし、続いてMiscellaneous:の Dens. Modeボタンをクリックすると図2のように表示される。

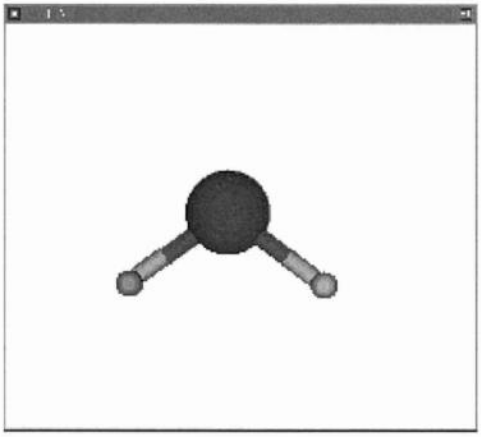


図 1

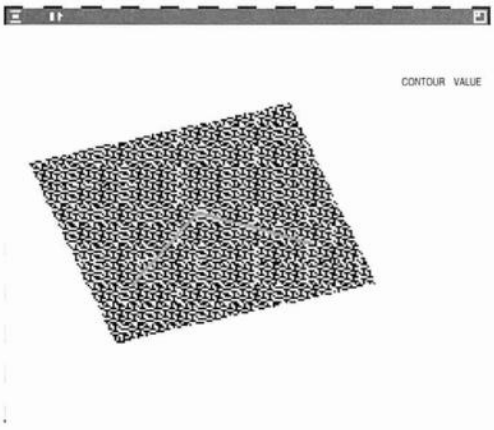
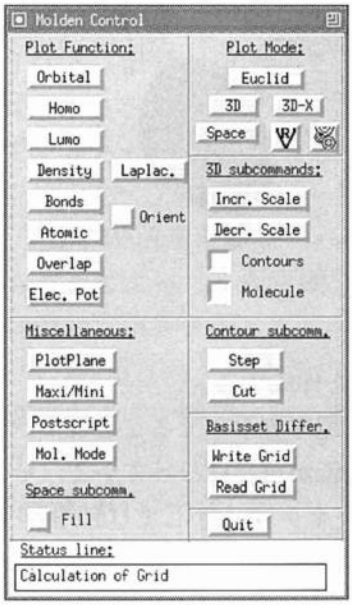


図 2



さらにPlot Function: からOrbitalボタンをクリックすると、図3のようなボックスが表示されるから描きたい分子軌道を選ぶ。上からエネルギーの低い順に分子軌道が並んでおり、中ほどにエネルギー、右側に占有電子数が表示されている。もしも、描かれた分子軌道が画面からはみ出すような場合には、Miscellaneous:のPlot Planeボタンをクリックし、Edge = 6.0 のようにボックスの大きさを指定して分子軌道が収まるように変更すればよい。次にPlot Mode:のSpaceボタンをクリックして描かせたい分子軌道の等値面の値を入力する。小さい値を入力すると波動関数の表示が拡がり、大きな数を入力すると波動関数の表示が小さくなる。（だいたい0.1 - 1.0ぐらいが適当だろう）。以上で、図4のような分子軌道が表示される。

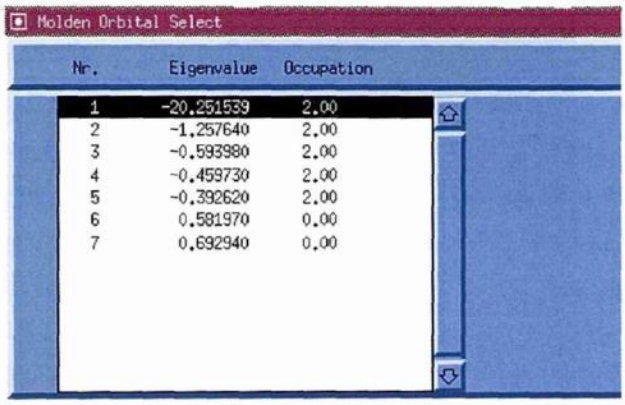


図 3

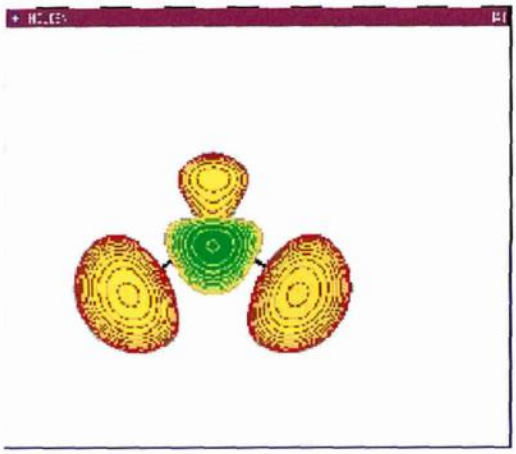


図 4

図 5

3-4 論文用のデータを作成する

とりあえず分子軌道を表示させることはできたが、この画面上で分子を自由に回転させることはできない。90度回転が限界になっている。そこで、以下の手続きをとる。Plot Mode:右下の等高線が入ったボタンをクリックしてO.K.を押す。さらにMiscellaneous: のMol Mode ボタンをクリックすると分子軌道が立体表示される(図5)。この画面上をクリックすれば、好きなアングルになるまで回転や並進を行うことができる。適当なアングルが決まったらpostscriptボタンをクリックする。好きな名前（ただし拡張子は.ps）を入力すればpostscriptファイルが作成されるから、GhostViewなどで見たり加工することができる。

分子軌道を描かせる以外にも、構造最適化の出力ファイルをそのまま読み込ませて、Select Point: からMovieボタンを押せば最適化の途中の構造を順次表示することができる。さらに、振動数解析を行った出力ファイルを読み込ませてから、Render Forces: のForceボタンを押せば、各振動数の動きをアニメーションで見ることができるなど、研究を行う上でデータ処理に費やす時間を随分節約することができる。

参考書

1) 日本電気株式会社、「分子軌道法プログラムGaussian98の利用法」情報第5号P.46 (1999)