

分子軌道法計算プログラム Gaussian 03 —その1—

和佐田（筒井）祐子 和佐田 裕昭

I. Gaussian 03 とは

我々は、常に物質に囲まれ、物質の変化に影響され、ともすると翻弄されて生きています。我々が認識できる現象で物質が関わらないものはありません。食べる、飲む、服を着るといった物質の動きが明白に見える現象から、一見したところ物質の動きがないが、実は激しい代謝を伴うものに至るまで、我々は常に物質に依存して活動しています。物質の変化がどうして起こるのかを知り、どうなるのかを予測できること、それは、道具や火の利用を覚えて以来、常によりよい生活を求めてはいろいろな新しい物質を利用してきたがる人類の大きな夢です。19世紀の化学者は、すでに、物質の反応を原子間の結合に基づいて経験的に説明していました。20世紀前半に量子力学が誕生して物質の性質が電子状態に支配されていることが示されて、電子状態についてのシュレーディンガー方程式を解けば、結合を説明できることはもとより、色、伝導性、あるいは反応のしやすさといった物質のあらゆる性質がわかるという道筋が見えてきたのです。

しかし、シュレーディンガー方程式は、水素原子や水素分子イオンといったごく単純な物質以外では、そのままでは解けない方程式でした。このため、近似を行った方程式を数値的に解くさまざまな方法が考案されてきました。Gaussian で採用されている分子軌道法や密度汎関数法はこれらの方法の一つとして提唱されたのです。20世紀後半のコンピュータの爆発的な発達の波に乗って、大きな分子の電子状態のみならず、分子構造をはじめとして電子状態で決まるさまざまな性質を計算するプログラムがいくつも開発されました。中でも Gaussian は世界でもっとも広く、あらゆる研究分野の人々に愛用されているプログラムです。1998年には、開発責任者の J. A. Pople はその功績により、ノーベル化学賞を受賞しています。Gaussian が他のプログラムよりも普及した理由は、物質に対する知識が豊富であればプログラムの知識がなくても使用できる簡便さと、計算化学者の厳しい要求に耐えるだけの豊富で柔軟なアルゴリズムがそろっていることによります。現在では Windows や Macintosh のようなパソコン用の Gaussian も提供されています。さらに、化学者のバイブルともいわれる実験化学講座の第五版では、第12巻に「計算化学」が登場しました [1]。21世紀の化学者は、電子状態の議論なくして物質を語ることはできない状態です。

名古屋大学情報連携基盤センターのスーパーコンピュータ HPC2500 には Gaussian シリーズの最新版 Gaussian 03 が登録されています。IT相談コーナーには、研究室のパソコン Gaussian に関する質問から、スーパーコンピュータの豊富な計算資源を利用した大規模計算の相談までたくさん質問が寄せられます。研究分野も、物質科学系だけではなく、数学、機械工学など多岐

にわたっています。パソコンの Gaussian の普及のせいも、以前に比べると、基本的な使用方法に関する質問よりも、試行錯誤で動いた出力結果の読み方や評価の方法、今後の発展の道筋といった研究の進め方そのものの相談が多くなっています。また、計算機の性能が高くなって分子構造を最適化しやすくなったせいも、大きな化合物をいきなり計算したものの、大量の数値データを扱うことは避けてしまい、ひとつの分子について分子軌道などを詳細に解析する傾向は薄れているように思われます。

以前のセンターニュースでは、Gaussian 94 について 5 回 [2-6]、Gaussian 98 について 1 回 [7] の解説を行ってきました。Gaussian 03 については、Gaussian 03 の新機能についての解説と併せてこれらの続編としての解説があります [8]。Gaussian 03 でも Gaussian 94 や 98 で用いられた理論的背景はもちろんのこと、プログラムの利用法もまた、そのまま適用できます。しかし、10 年近い年月がたち、当時とは計算の動向も環境も異なってきています。例えば、今はもっとも頻繁に用いられる B3LYP をはじめとするハイブリッド密度汎関数法ですが、当時は、水の二量体の最適化構造すらおかしい結果を与えるなどまだ整備が進んでいませんでした。また、計算環境もパソコンからスーパーコンピュータまで選択肢が広がり豊かになった反面、試行錯誤で何となく動かしてしまったものの結果の評価ができないという状況はかえって増加しています。このような状況を踏まえて、Gaussian 94 の解説の続編ではなく、Gaussian 利用の方法の基本からはじめて、現在よく使用される方法や、知っている便利なことについてこれから数回に渡って述べてゆきたいと思います。

今回は Gaussian 03 による分子軌道法計算の実行例を構造最適化を例にしてお話します。物質科学にかかわるどの分野の研究者にとっても、化合物の構造の情報は物質を扱う上で不可欠であるので、分子軌道に関する知識が希薄でも直感的にわかりやすく、また、もっとも利用の多い計算例といえます。まず、計算を行う前に必要なことについて述べます。

II. Gaussian 03 を利用する前に

計算を行う前に、実験や調査を含めた全体の研究の中で知りたいことを限定し、どの物質のどの性質をどの近似レベルで計算したらよいかきちんと目標をたてましょう。計算機におまかせしてお伺いをたてるといった姿勢ですと、おもわぬ間違った結論にふりまわされかねません。

Gaussian 03 ではさまざまな計算方法で電子状態と物理量を決定できます。しかし、計算された電子状態や物理量はすべて、シュレーディンガー方程式の近似解であり、各計算方法ごとに近似のレベルが異なります。理論の適用範囲については、常に注意を払う必要があります。それらの方法の背景となる理論を学ぶことは重要で、実験化学講座でも説明がなされています。また、最近の量子化学の教科書 [9] でも、論文等でよく目にする方法や用語を一章を設けて解説しています。しかし、これらの説明は紙面の都合でかなり簡略化されていますので、より詳細な内容については、電子状態理論についての教科書を参照する必要があります。密度汎関数法が普及する以前には、定評のある分子軌道法の教科書 [10,11] を参照することが多く、完成度の高いこれらの教科書は現在でも有用です。密度汎関数法や、とくに現在よく使用されるハイブリッド密度汎

関数法についての解説は、最近の教科書 [12] を参照するとよいでしょう。

理論的な枠組みをある程度理解した上で、対象とする物質や物性についての類似の計算例を論文などできちんと把握し、どの程度の近似レベルでどの程度の結果が期待できるのかを確認してください。実験化学講座には、計算の実例が示されていますので、それらを参考にするのもよいでしょう。また、問題を扱うのに現時点で可能な限り正確な計算が何かということも確認します。小さな分子では、かなり正確な計算が可能ですが、大きな分子で同じ計算を行うと時間と計算資源が要求されるばかりで、定性的な結論すら得られないことになります。計算の規模は基底関数の数や電子数といった分子の大きさに相関する数のべき乗に比例するので、原子数を少し多くしただけのつもりでも計算規模は思いのほか大きくなっているということがあります。Gaussian 03 ではさまざまな物理量が計算できますが、どのような計算でも避けておれないのが、対象とする化学種のエネルギーの計算です。さまざまな物理量の計算の手間は、エネルギー計算の手間と相関しています。エネルギー計算の近似レベルと計算時間の関係は表 1 のようになっています。いちばん多用される非経験的分子軌道法や密度汎関数法では、方程式の形から計算時間が基底関数の数の 4 乗に比例することが知られていますが、現在では計算アルゴリズムの発達により 2 乗から 3 乗に比例するとの報告があります [13]。

表 1 電子状態計算における分子の大きさ M と計算規模との関係^a

方法論	計算規模	計算可能な原子の数の目安 ^b
HF, KS-DFT (B3LYP など)	$M^2 \sim M^3$	50 ~ 200
MP2	M^5	25 ~ 50
CISD	M^6	10 ~ 15
CCSD	M^6	10 ~ 15
CCSD(T)	M^7	8 ~ 12

^a 文献 13 及び 14 を参照のこと

^b 第三周期以降が多い分子では扱える原子数が減る

計算規模を縮小するには、近似レベルを下げるという方法もありますが、注目したい物理量が大きな化合物のごく一部分の環境に依存するということがよくあります。このような場合には、モデル化を行い、より簡単なモデルに対する正確な計算を行うという方法がよく使われます。化学合成の現場では、溶媒に対する溶解度を改善したりプロトンの解離などの余計な副反応を避けるために、tert-ブチル基のような大きな置換基をしばしば導入します。これらの基が注目したい反応エネルギーに大きく影響しないと判断される場合には、結合の極性を大きく変化しない程度にこれらの基を簡単な基に置き換えるといった方法も有効です。アルキル基はしばしば水素に置き換えられますが、計算は真空中ないしは水素結合のない誘電体中で行いますので、プロトン解離反応などが優先的に進むということはありません。静電的な影響のみが期待される場合には、外部電場や点電荷で置き換えるという方法もあります。しかし、大きな置換基の立体障害による構造変化及びその反応エネルギーへの影響を評価したいなど、電子的な相互作用以外の影響が重要なこともあります。このような場合には、大きな置換基の部分のみを分子力学で扱い、反応中

心部分を精度の良い計算で扱う ONIOM 法などを利用するとよいでしょう。測定実験で概測を行うように、大きな計算を行う前にモデル化した系を扱ってみて、計算からどの程度の結論が得られるのか概算するのも重要です。モデル化にはいくつかの方法があり、研究者の科学的な主観に依存します。対象とする物質や現象の特徴をよくふまえてモデル化を行い、適用範囲に注意する必要があります。

III. Gaussian 03 の入力データ

Gaussian 03 の入力データは、計算環境の指定をする Link 0 コマンド、計算の方法を指定するルートセクション、計算内容の覚え書きのタイトル、分子の電荷やスピン状態や構造といった化合物の基本情報、さまざまな計算に対応したその他の付加情報の順に構成されています。この中で、ルートセクション、タイトル及び化合物の基本情報は必須です。ここでは、Gaussian 03 による計算例を簡単に示すために、よく利用される SCF 計算による構造最適化を取りあげます。

図 1 に水の構造最適化計算の入力データを示します。見慣れない方法で分子構造を指定していますが、Z マトリックスと呼ばれる方法で、結合長や結合角といった化学分野の人々にとってなじみぶかい構造パラメータを用いて分子構造が指定できる便利な方法です。近年は分子モデリングソフトが普及し、簡単に入力座標を作ることができるのであまり使われなくなってしまいましたが、構造がすでにわかっている大きな化合物に置換基を導入したり、大きな置換基を水素原子に置換するなど、構造の一部だけを変更する場合に知っているとは非常に便利な方法です。また、内部座標の一部を完全に固定したり、対称性を保持したり、いくつかの結合長を等しくして構造最適化を実行したい場合には、Z マトリックスに基づいた構造最適化を行います。

はじめに、どのような計算を行うのかを指定します。これには、ルートセクションと呼ばれる # で始まる行を利用します。ここでは、電子状態の計算方法をはじめ、計算によって得られた電子状態からどのような物理量を求めるかに至るまで、さまざまな指定を行います。ここに指定できるキーワードやオプションの解説がユーザーズリファレンス [15] やホームページ [16] にありますのでご覧ください。例では、以下のように指定されています。

```
#p rhf/sto-3g opt pop=full
```

STO-3G と呼ばれる基底関数を使用して、RHF レベルで電子状態を決定して構造最適化を行い、すべての分子軌道の出力を行うことを指定しています。# の後ろの p は詳細出力を意味し、出力が豊富になり、各段階の計算時間も出力されます。p を指定しない場合には、最低限の出力しか行いません。空白行を置き、つぎにタイトル行を指定します。ここには計算に関するあらゆるコメントを入れます。出力ファイルにそのまま写されますので、何を計算したのかが一目で分かるような簡潔な内容を記しておきます。さらに、空白行を置いてから、化合物の基本情報を指定します。最初に、分子の電荷とスピン多重度を指定します。水分子のように中性分子でスピン多重度が一重項の場合には、

```
0 1
```

と指定します。水酸化物イオンのような一重項の一価陰イオンでは

と指定します。

分子の電荷とスピン多重度に続いて分子の座標を指定します。分子モデリングソフトを利用した場合には、座標のテキスト出力などを利用して、原子の元素記号と xyz 座標からなるデータを出力してこの部分に貼付けます。ここでは Z マトリックスにより、原子間距離、結合角及び二面角といった分子内座標で構造を指定しています。一般に、Z マトリックスの第 n 行目は、

$$N \quad a_1 \quad R \quad a_2 \quad T \quad a_3 \quad D$$

の形式です。N は n 番目の原子の元素記号です。R は入力済みの a_1 番目の原子と n 番目の原子との距離を Å 単位であらわしています。T は、 $\angle n - a_1 - a_2$ で決まる結合角、D は、 $\angle n - a_1 - a_2 - a_3$ で決まる二面角です。Z マトリックスでは、最初の三個の原子は、特殊な役割をします。第一番目の原子は原点に、二番目の原子は z 軸上の正の位置に、三番目の原子は、 zx 平面上の x が正の領域に位置します。これらのことを指示するために、Z マトリックスの一行目は元素記号 N のみ、二行目は N a_1 R まで、三行目は N a_1 R a_2 T までとなります。

Z マトリックスの後には、空白行を一行入れてから Z マトリックスの中の変数値を指定します。ここでは、酸素と水素の結合長を 0.958 Å、 $\angle \text{H—O—H}$ の結合角を 104.5° に指定しています。Gaussian のそれぞれのデータセットは空白行で区切られます。ルートセクションやタイトル行が複雑になれば複数行に渡ることもありますが、データの終わりは空白行で示します。Gaussian の入力データの基本は以上ようになっています。

センターのマシンを利用する場合には、並列化されている計算は、並列計算した方が速くて少ない課金で計算できます。そこで、以下では並列計算の入力データについて説明し、実行例を示します。

並列計算のためには、上記の入力データの前に Link 0 コマンドで並列計算を指定します。図 1 のようにルートセクションの前に、%NPROC=4 を指定します。このように指定すると、最大で 4 CPU の並列計算を行います。SCF 計算による構造最適化は、結晶構造などの周期境界条件を利用する計算以外については Gaussian の中でもっとも並列化が進んだ計算です。

```

%NPROC=4
#p rhf/sto-3g opt pop=full

water molecule : geometry optimization

0 1
O
H 1 R1
H 1 R1 2 T1

R1 0.958
T1 104.5

```

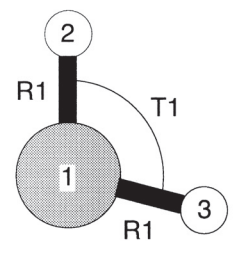


図 1 RHF/STO-3G による水の構造最適化の入力データ

IV. センターでの Gaussian 03 の利用方法

センターで Gaussian 03 が使用できるコンピュータは、HP2500 (hpc) です。hpc へのログインはインターネットに接続したコンピュータから、以下のように行います（この例では Mac OS X から操作しています）。telnet, ssh いずれのプロトコルも利用可能です。

```
[ywasada:~] ywasada% ssh -l w4900Xa 133.6.1.153
w4900Xa@133.6.1.153's password: ← パスワードを入力
Last login: Wed May 11 21:26:43 2005 from XXX.YYYY.nago
Sun Microsystems Inc. SunOS 5.9 Generic May 2002
Terminal Type(Default is vt100): ← エンターキーを入力
hpc%
```

図2 センターのアプリケーションサーバ hpc へのログイン例。ユーザは w4900Xa

Gaussian は長時間にわたって大量の計算機資源を占有するので、バッチシステム NQS を利用します。バッチシステムを利用するには、Gaussian の入力データとは別にスクリプトファイルを用意する必要があります。

(1) ジョブの準備（スクリプトファイルの作成）

スクリプトファイルには、Gaussian を実行するのに必要な入出力ファイル名をはじめ、実行時間や使用する CPU 数などの、Gaussian の実行条件や実行命令を記述します。ファイルの編集は、各自、慣れた方法で行います。データが複雑であれば、パソコンのエディタで編集して ftp でセンターに転送するのが簡単です。センター端末で編集する場合には、テキスト・エディタや emacs 等を利用します。図 3a に標準的なスクリプトファイルの例を示しました。

a ホームディレクトリで実行

```
# @$-q p8 -eo -o g03p.err -lp 4
g03 example1.dat example1.out
```

b ディレクトリ bench の下で実行

```
# @$-q p8 -eo -o g03p.err -lp 8 -lT 100:00:00
cd bench
g03 large.dat large.out
```

図3 Gaussian 実行用スクリプトファイルの例

一行目は、キューの実行条件を示しています。p8 キューを使用し、システムからのエラーメッセージ等を g03p.err に出力し、CPU は 4 個使用することを意味しています。二行目が、Gaussian の実行命令で、入力ファイル名が example1.dat、出力ファイル名が example1.out になります。

Gaussian で通常使用するキューは、並列化効率や利用時間を考慮すると、p8 及び p16 が適切です。キューを指定しただけでは並列計算は行われないので、実際に使用する CPU 数を -lp に

続いて指定します。入力データに %NPROC= に続いて指定されている数字を指定します。よく利用される Hartree-Fock 法や密度汎関数法による構造最適化計算などでは、8 から 12 CPU 程度の並列計算が効率的で、16 CPU 程度までは、並列化効率が上がりますが、それ以後は飽和してしまいます [17]。

【より進んだ使用法】

キューの選定には、並列計算に用いる CPU 数も重要ですが、ジョブ種別表の「経過時間」に注意する必要があります。これは、ジョブ開始後、実際に経過できる時間の制限です。CPU 時間は指定さえすれば無制限に大きくできますが、大きなジョブは経過時間の制限で止まってしまうことがよくあります。また、期待したほど並列化効率がよくない場合にも、処理が期待した時間内に終わらず、CPU 時間が余っていても止められてしまいます。長時間ジョブでは、例えば 1 CPU しか使用しなくても、p64 などのキューを使用するのがよいでしょう。

各キューには、CPU 使用時間の標準値が決められています。大きなジョブでは、用途にあった時間を指定する必要があります。CPU 時間は各 CPU で利用した時間の合計値であり、10 時間の指定で 2 CPU をフル稼働すると 5 時間しか計算しないことにも注意が必要です。CPU 時間は -IT に続いて指定します。図 3b の例では 100 時間が指定されています。

計算データが増えてくると大量のファイルの管理の必要上、計算をログインディレクトリではなく、さらに下のディレクトリに入出力データを置いて実行したいことがあります。図 3 の b にこのような場合のスクリプトファイルの例を示しました。NQS は何も指定しないとログインディレクトリをカレントディレクトリにしてしまいますので、g03 コマンドを実行する前に、cd コマンドでファイルのあるディレクトリに移動するようにしてください。例では、ログインディレクトリの下ディレクトリ bench に、入力ファイル large.dat、出力ファイル large.out を置いたときのスクリプトファイルになります。

(2) ジョブの実行と確認

入力ファイルとスクリプトファイルが用意できたらコマンドラインから NQS にジョブを投入します。先のスクリプトファイル名を g03.cmd とします。ジョブの投入は qsub コマンドで行います。

```
hpc% qsub g03.cmd  
Request 5877.sp0 submitted to queue: p8.
```

ジョブの状況は qstat コマンドで確認します。投入されたジョブは、他のジョブで混んでいる場合など必ずしもすぐには実行されません。

```
hpc% qstat p8
p8@sp0; type=BATCH; [ENABLED, RUNNING]; pri=31
  0 exit; 6 run; 0 queued; 0 wait; 0 hold; 0 arrive;

REQUEST NAME      REQUEST ID      USER PRI    STATE    PGRP
1:      gauss03      5875.sp0      w4900Xa 31  RUNNING    4900
2:      g03.cmd      5877.sp0      w4900Xa 31  RUNNING   13933
3:      TEST1.sh      5879.sp0      w4900Xa 31   QUEUED
```

STATE が RUNNING のジョブは実行されています。QUEUED は実行待ちです。また、qstat -a とすると、すべてのキューについての混雑状況がわかります。

ジョブを中止する必要がある場合には、ジョブの REQUEST ID を qstat コマンドで確認します。前述のジョブでは ID が 5877 ですので、

```
hpc% qdel -k 5877
Request 5877.sp0 is running, and has been signalled.
```

とします。中止したジョブを再開するコマンドはありませんので、ID を間違えないよう慎重に行ってください。また、キューに入ったままいつまでも実行できないジョブをキャンセルする場合には、-k は必要ありません。

図 4 に、Gaussian を実行中に使用した C シェルコマンドの例を示しました。qstat コマンドで計算が実行されたことを確認したら、必ず出力ファイルの内容を確認します。more コマンドを使用して、出力を画面に表示させて確認するとよいでしょう。このコマンドは出力を一画面ずつ表示します。スペースキーを押すと次画面に移動し、b キーを押すと前画面に戻ります。また、/ キーを押して文字列を入力すると、最初に検索された文字列のところに飛ぶことができます。どのような計算であっても最低限確認しなければならないのは、出力されている計算方法や電荷や多重度、構造及び基底関数が自分の望んだとおりになっているのかということです。

```
hpc% more example1.out
```

計算方法のキーワード、電荷、多重度、基底関数名などを確認します。化合物の構造は複雑な場合には大量の座標データになってしまうので、座標データを加工して分子構造を可視化するソフトウェアを利用します。化学系の研究室で普及している CS Chem Office® などを利用するのもよいでしょうし、センターのホームページから MOLCAT をダウンロードして使用するのもよいでしょう。いずれのソフトウェアでも、センターに登録されたコマンド moled で出力ファイルから取り出して画面表示した座標データをコピーし、可視化ソフトにペーストします。

```
hpc% moled < example1.out
O      0.000000    0.000000    0.127141
H      0.000000    0.757972   -0.508564
H      0.000000   -0.757972   -0.508564
```



```

hpc% qsub q03.cmd ← バッチリクエスト q03.cmd の実行依頼
Request 6747.sp0 submitted to queue: p8. ← p8にて実行
hpc% qstat p8 ← バッチリクエストの実行状況を見る。
p8@sp0; type=BATCH; [ENABLED, RUNNING]; pri=31
  0 exit; 12 run; 0 queued; 0 wait; 0 hold; 0 arrive;

```

REQUEST NAME	REQUEST ID	USER	PRI	STATE	PGRP
<11 requests RUNNING>					
12: q03.cmd	6747.sp0	w4900Xa	31	RUNNING	16136

実行中

```

hpc% tail example1.out ← 出力ファイル "example1.out" の最後から10行を出力させ、進行状況を見る

```

Center Number	Atomic Number	Atomic Type	Coordinates (Angstroms)		
			X	Y	Z
1	8	0	0.000000	0.000000	0.129793
2	1	0	0.000000	0.751281	-0.519171
3	1	0	0.000000	-0.751281	-0.519171

tail -n 10 出力名で最後から10行の出力ができる。

```

Rotational constants (GHZ): 670.3584940 444.2188331 267.1738073
Leave Link 202 at Thu Mar 16 15:36:53 2006, MaxMem= 8388608 cpu: 0.1
hpc% ! tail example1.out ← 直前のコマンドの再実行

```

Center Number	Atomic Number	Atomic Type	Coordinates (Angstroms)		
			X	Y	Z
1	8	0	0.000000	0.000000	0.126468
2	1	0	0.000000	0.763450	-0.505871
3	1	0	0.000000	-0.763450	-0.505871

```

Rotational constants (GHZ): 706.0689140 430.1702431 267.3115378
Leave Link 202 at Thu Mar 16 15:37:02 2006, MaxMem= 8388608 cpu: 0.1
hpc% grep 'E(' example1.out ← 構造最適化にともなうエネルギー変化の確認
SCF Done: E(RHF) = -74.9630485603 A.U. after 7 cycles
SCF Done: E(RHF) = -74.9657634610 A.U. after 7 cycles
SCF Done: E(RHF) = -74.9658674044 A.U. after 6 cycles
SCF Done: E(RHF) = -74.9659011699 A.U. after 6 cycles
hpc% grep 'Maximum F' example1.out ← 構造最適化の進行にともなう分子内の force の最大値の変化の確認
Maximum Force 0.037172 0.000450 NO
Maximum Force 0.008264 0.000450 NO
Maximum Force 0.003903 0.000450 NO
Maximum Force 0.000172 0.000450 YES
hpc% tail example1.out
9659012#RMSD=5.873e-11#RMSF=1.061e-04#Dipole=0.5317657,0.,0.411737#PG=
C02V [C2(O1),SGV(H2)]#@@

```

```

HERE WE GO.....
SLIDING DOWN THE RAZOR BLADE OF LIFE.....
                                TOM LEHRER
Job cpu time: 0 days 0 hours 1 minutes 37.3 seconds.
File lengths (MBytes): RWF= 18 Int= 0 D2E= 0 Chk= 13 Scr= 1
Normal termination of Gaussian 03 at Thu Mar 16 15:37:19 2006.
hpc% moled < example1.out ← Gaussian 03 正常終了
O 0.000000 0.000000 0.127141
H 0.000000 0.757972 -0.508564 } 分子構造可視化ソフトにペーストする
H 0.000000 -0.757972 -0.508564

```

図 4 Gaussian 実行中に使用した C シェルコマンドとその結果

moled は example1.out の出力の中で最後にあらわれる座標を表示するので、構造最適化計算の途中データを読み込ませると、現在計算している構造を表示することができます。

また、複雑な化合物では、構造を表示しても、他原子の影になつたりして正しい構造か判断しづらい場合もよくあります。座標出力のあとに出力される基底関数や電子数の情報とともに出力される核間反発エネルギーを活用します。これは、裸の原子核の間に働く全クーロン反発エネルギーです。特に、以前に Gaussian で計算した結果を使用する場合には、以前の出力と比較して、50 原子ぐらいの有機化合物では 0.001 a.u. 程度の範囲で一致するかを確認します。この値が大きくなるようであれば、入力データに問題があると考えべきです。

大きな計算では構造最適化が正しい方向に進んでいるかを常に確認する必要があります。初期構造が悪くてひずみが大きい場合には、置換基の向きが途中でひっくり返ったりして準安定な構造にとどまってしまうことがあります。また、不安定な中間体や遷移状態の構造最適化では、途中で変曲点を越えてしまったりすると、意味のない構造を新たに探索し始めてしまうことがよくあります。安定構造の最適化が順調に進んでいる場合には、エネルギーが低下し、分子にかかるひずみ (force) が減少していきます。この確認には grep コマンドを使用すると便利です。

```
hpc% grep 'E(' example1.out
SCF Done: E (RHF) = -74.9630485603      A.U. after 7 cycles
SCF Done: E (RHF) = -74.9657634610      A.U. after 7 cycles
SCF Done: E (RHF) = -74.9658674044      A.U. after 6 cycles
SCF Done: E (RHF) = -74.9659011699      A.U. after 6 cycles
hpc% grep 'Maximum F' example1.out
Maximum Force      0.037172      0.000450      NO
Maximum Force      0.008264      0.000450      NO
Maximum Force      0.003903      0.000450      NO
Maximum Force      0.000172      0.000450      YES
```

この例のように、すんなりと構造最適化が進行する場合には、順調にエネルギーが低下し、ひずみが小さくなってゆくことがわかります。急にエネルギーが大きくなったりひずみが大きくなったりしている場合には、構造の大きな変化が原因になっていることが多く、場合によっては変曲点を越えていることがあるので、構造を図示したり、キーポイントになる構造パラメータなどを確認します。

【より進んだ使用法】

座標出力のあとに出力される核間反発エネルギーや基底関数の数、電子数は、構造最適化を再実行する計算などの、以前の計算結果を利用して新しい計算を行う場合にとくに重要です。チェックポイントファイルを使用するなどして簡単にデータを移動することができるようになってきた反面、目的外の計算を簡単に実行してしまう危険性もまた増大しています。構造、基底関数、電子数が正しく引き継がれているのかを以下の情報で必ず確認せねばなりません。

- (1) 核間反発エネルギー。
- (2) 基底関数の数。一致すること。基底関数を大きくしたときには以前よりも増えているか、増え方は適切か。

(3) d 関数の型 (5d か 6d か)

(4) 電子の数

(4) は、重原子の計算などで、ECP (effective core potential) を用いた場合に重要になります。間違った ECP を指定する、あるいは指定し忘れると、値がおかしくなります。

また、分子軌道係数を指定した場合には、つぎの (5) の確認を行います。

(5) SCF サイクル一回目のエネルギーが、前回の計算と同程度か、あるいは基底関数や計算方法の変更に対し適切な範囲にあるか。

(3) 出力ファイルの読み方

計算が終了すると、全計算結果が出力ファイルに出力されています。構造最適化ではサイクルごとの構造、エネルギー、ひずみの計算が出力されますので、ファイルはかなりの大きさになります。図 5 に、読み込みデータの出力と構造最適化の最終回 (四回目) の一部のデータを示しました。はじめの部分には、入力したルートセクション、タイトル、構造データがそのまま出力されます。GradGrad...Grad の行に続いて構造最適化の最終回のデータが出力されます。Standard orientation が主軸を z 軸として重心を原点とした座標系で、分子軌道やひずみの計算に実際に用いられます。Input orientation には、入力した配向に近い座標が示されています。これらの間に出力されている Distance matrix (angstroms): にはすべての原子間距離が出力されています。Standard orientation の下方に、symmetry-adapted 基底関数の情報があり、それに続いて、確認事項として重要な基底関数と電子の個数が示されています。7 basis set とは酸素の上の 1s, 2s, 2p_x, 2p_y, 2p_z の 5 個の基底関数と水素のそれぞれ 1 個ずつの 1s の基底関数を示しています。5 alpha electrons と 5 beta electrons は α 電子と β 電子とが 5 個ずつあることを意味しています。その下には核間反発エネルギーが出力されています。Closed shell SCF: から下が SCF 計算を示しています。繰り返し計算を 6 回行って収束した結果が SCF Done: に出力されています。

```
SCF Done:  E(RHF) = -74.9659011699      A.U. after      6 cycles
```

これが水分子の分子軌道法計算による全エネルギーです。単位は、a.u. すなわち atomic unit です。hartree とも呼ばれます。1 hartree は水素原子のイオン化エネルギーの二倍の値であり、我々のなじみ深い単位系では、627.50955 kcal/mol, 27.2116 eV あるいは 219474.7 cm⁻¹ になります。今の場合 47000 kcal/mol ほどでとても大きな値ですが、電子と原子核がばらばらになった状態が 0 エネルギーになっているためです。Axes restored to original set に続いて分子構造にかかる力の計算がはじまります。30 行ほど下には、Maximum Force などの項目が並んでおり、Converged? の部分がすべて YES になっています。これは、あらかじめ予定されていた閾値 (しきい値) が達成されて構造最適化計算が終了したことを意味しています。その下の Optimized Parameters には最終的な構造パラメータが記されています。この例では、一番の酸素と二番の水素の間の距離が 0.9893 Å、一番の酸素と三番の水素の間も等しく、結合角は、100.0274° です。気相中での測定値は 104.5° ですので、RHF/STO-3G では定量的な正確さに欠くといえます。

```

*****
Gaussian 03: Su64S-G03RevC.02 12-Jun-2004
31-Jan-2006
*****
%CHK=WATER.chk
Default route: MANDISK=4GB
*****
#p rhf/sto-3g opt pop=full GPRINUT
*****

```

```

Water molecule: geometry optimization 6/4
Symbolic Z-matrix:
Charge = 0 Multiplicity = 1
O      1      R1
H      1      R1      2      T1
H      104.5
R1      0.958
T1

```

Isotopes and Nuclear Properties:

Atom	1	2	3
ATWgt=	16	1	1
ATWgtc=	15.9949146	1.0078250	1.0078250
ATWgtf=	16	1	1
ATZeff=	0.0000000	0.0000000	0.0000000
ATOMom=	0.0000000	0.0000000	0.0000000
ATGFac=	0.0000000	2.7528460	2.7528460

Input orientation:

Center Number	Atomic Type	X	Y	Z
1	8	0	-0.025935	0.000000
2	1	0	0.012667	0.000000
3	1	0	0.940754	-0.230212

Distance matrix (angstroms):

1	0	0.000000	0.000000	0.000000
2	0	0.988263	0.000000	0.000000
3	0	0.988263	1.515944	0.000000

Stoichiometry H2O

Framework group C2V(C2(O),SGV(H2))

Deg. of freedom 2

Full point group C2V

Largest Abelian subgroup C2V

Largest concise Abelian subgroup C2

Standard orientation: Nop 4, Nop 4, Nop 2

Rotational constants (GHz): 698.6120361, 436.4113211, 268.6131520

Standard basis: STO-3G (5d, 7f) ← 入力した原子軌道

There are 4 symmetry adapted basis functions of A1 symmetry.

There are 0 symmetry adapted basis functions of A2 symmetry.

電子数 合計10個

原子軌道の数

5個

1個

1個

7個

合計

10個

原子軌道の数

5個

1個

1個

7個

合計

10個

入力したストロクス

構造最適化計算の四回目
のサイクル
直角座標

原子間距離

点群

分子軌道の計算
に用いる座標

以下が1の軌道
への座標です

There are 1 symmetry adapted basis functions of B1 symmetry.
There are 2 symmetry adapted basis functions of B2 symmetry.
Integral buffers will be 131072 words long.
Raffenetti 1 integral format.
Two electron integral symmetry is turned ON.
① Basis functions, 21 primitive gaussians.
② Cartesian basis functions
③ nuclear repulsion energy : 省略
④ Guess basis will be translated and rotated to current coordinates.
Initial guess orbital symmetries:
Occupied (A1) (A1) (B2) (A1) (B1)
Virtual (A1) (B2)

The electronic state of the initial guess is 1-A1.
Converged SCF:
Requested convergence on RMS density matrix=1.00D-08 within 128 cycles.
Requested convergence on MAX density matrix=1.00D-06.
Requested convergence on energy=1.00D-06.
No special actions if energy rises.
Using DIIS extrapolation, IDIIS= 1040.
Integral symmetry usage will be decided dynamically.
: 省略

Cycle 1 Pass 1 IDIag 1:
DIIS: error= 3.26D-04 at cycle 1 NSaved= 1.
: 省略

Cycle 6 Pass 1 IDIag 1:
DIIS: error= 1.04D-10 at cycle 6 NSaved= 6.
: 省略

ErrMax= 1.04D-10 EMaxC= 1.00D-01 EMatC= 7.12D-20 BMatP= 1.95D-12

IDIUse= 1 WCom= 1.00D+00 WEn= 0.00D+00 DE= 0.510D-04 0.270D-03 0.100D+01

CoeffCom: 0.138D-07 0.144D-05 0.428D-05 0.510D-04 0.270D-03 0.100D+01

GapEff: 0.975 GCals= None 0.000

RMSDP=5.87D-11 MaxDP=1.76D-10 DE=4.21D-12 OVMax= 0.00D+00

SCF Done: E(RHF) = -74.3553016397 A.U. after 6 cycles
Conv= 0.5873D-10 -V/T = 2.0060

KE= 7.451894721432D+01 PE= -1.963553732642D+02 EE= 3.796275383678D+01

Dipole = -3.44536395D-17 -3.22040426D-16 -6.72534053D-01

*** Pass restored to original set ****

Center Number	Atomic	X	Y	Z
1	8	-0.000162620	0.000000000	-0.000125913
2	1	-0.000002992	0.000000000	0.000171834
3	1	0.000165611	0.000000000	-0.000045920

Cartesian Forces: Max 0.000171834 RMS 0.000106129

GradGradGradGradGradGradGradGradGradGradGradGradGradGradGradGradGradGrad

Berry optimization.

Internal Forces: Max 0.000171586 RMS 0.000140490

Search for a local minimum.

Step number 4 out of a maximum of 20

All quantities printed in internal units (Hartrees-Bohrs-Radians)

Update second derivatives using D2Corr and points 1 2 3 4

Trust test= 9.87D-01 Rlist= 1.35D-02 DMMaxt set to 4.24D-01

The second derivative matrix:

分子の全エネルギー

エネルギーの
一次微分

構造最適化のサイクルが
四回目

図 5-1 Gaussian 03 による水の RHF/STO-3G による構造最適化計算の出力ファイル


```

N-N= 8.907801043241D+00 E-N= -1.963553732625D+02 KE= 7.451891721432D+01
Symmetry A1 KE= 6.651718317858D+01
Symmetry A2 KE= 0.000000000000D+00
Symmetry B1 KE= 2.944371533728D+00
Symmetry B2 KE= 2.944371533728D+00
Orbital energies and kinetic energies (alpha):
1 2
1 (A1)--O -20.25156 28.66068
2 (A1)--O -1.25762 2.37599
3 (B2)--O -0.59393 1.47214
4 (A1)--O -0.45975 2.22192
5 (B1)--O -0.39262 2.52873
6 (A1)--Y 0.26493 2.73962
7 (A1)--Y 0.26493 2.73962
Total kinetic energy from orbitals= 7.451891721432D+01
No NMR shielding tensors so no spin-rotation constants.
Final structure in terms of initial Z-matrix:
O
H 1.1.R1
H 1.1.R1,2.T1
Variables:
R1=0.98926345
O 0.00000000
H 1.1.XCNG-HRXTORRHFSTO-3GXH2O1YK49108X311-Jan-2006GXYP RHF/STO-3G
OPT ROB=FULL GFINDITYWater molecule: geometry optimization 6/4YK0.1Y
O,-0.1005290796,0.,-0.07783793YH,-0.0619270901,0.,0.9106720871YH,0.866
1597272,0.,-0.287968647YVersion=Sub64S-G03RevC.02XState=1-A1VHF=-74.96
59012YRMSD=5.873e-11YRMSF=1.061e-04YDipole=0.5317657,0.,0.411737YF6=CO
2Y [C2(O1),SGV(H2)]YF#

```

```

1 (A1)--O -20.25156 28.66068
2 (A1)--O -1.25762 2.37599
3 (B2)--O -0.59393 1.47214
4 (A1)--O -0.45975 2.22192
5 (B1)--O -0.39262 2.52873
6 (A1)--Y 0.26493 2.73962
7 (A1)--Y 0.26493 2.73962
Total kinetic energy from orbitals= 7.451891721432D+01
No NMR shielding tensors so no spin-rotation constants.
Final structure in terms of initial Z-matrix:
O
H 1.1.R1
H 1.1.R1,2.T1
Variables:
R1=0.98926345
O 0.00000000
H 1.1.XCNG-HRXTORRHFSTO-3GXH2O1YK49108X311-Jan-2006GXYP RHF/STO-3G
OPT ROB=FULL GFINDITYWater molecule: geometry optimization 6/4YK0.1Y
O,-0.1005290796,0.,-0.07783793YH,-0.0619270901,0.,0.9106720871YH,0.866
1597272,0.,-0.287968647YVersion=Sub64S-G03RevC.02XState=1-A1VHF=-74.96
59012YRMSD=5.873e-11YRMSF=1.061e-04YDipole=0.5317657,0.,0.411737YF6=CO
2Y [C2(O1),SGV(H2)]YF#

```

At the touch of a day, everyone becomes a poet.
 Job cpu time: 0 days 0 hours 2 minutes 26.8 seconds.
 File lengths (MB/byte): RWP= 48 Int= 0 D2B= 0 Chk= 10 Scr= 1
 Normal termination of Gaussian 03 at Tue Jan 31 10:06:02 2006.

```

7 3 H 1S 0.83467J Condensed to atoms (all electrons):
1 0 7.82381 3 0.253913 0.253913
2 0 7.82381 0.253913 -0.045423
3 0 7.82381 0.253913 -0.045423 0.626183
Mulliken atomic charges:
1 1 0 -0.330657
2 2 H 0.000000
3 3 H 0.165329
Sum of Mulliken charges= 0.00000
Atomic charges with hydrogens summed into heavy atoms:
1 0 0.000000
2 H 0.000000
3 H 0.000000
Sum of Mulliken charges= 0.00000
Electronic spatial extent (au): <R*2>=
Charge= 0.0000 electrons 18.2666
Dipole moment (field-independent basis, Debye):
X= 0.0000 Y= 0.0000 Z= -1.7094 Tot= 1.7094
Quadrupole moment (field-independent basis, Debye-Ang):
XX= -0.0000 XY= 0.0000 XZ= 0.0000
YY= -0.0000 YZ= 0.0000
ZZ= -0.0000
Traceless Quadrupole moment (field-independent basis, Debye-Ang):
XX= -0.8107 YY= 0.8292 ZZ= -0.0184
XY= 0.0000 XZ= 0.0000 YZ= 0.0000
Octapole moment (field-independent basis, Debye-Ang*2):
XXX= 0.0000 XXY= 0.0000 XZX= -0.1747 XYY= 0.0000
XXY= 0.0000 XXZ= 0.0191 XZZ= 0.0000 YZZ= 0.0000
YYZ= -0.5313 XYZ= 0.0000
Hexadecapole moment (field-independent basis, Debye-Ang*3):
XXXX= -0.8653 YYYY= -0.8653 ZZZZ= -2.2181
XXXZ= 0.0000 XYYZ= 0.0000 YVYZ= 0.0000
ZZZY= 0.0000 XXYZ= -1.8081 XXZZ= -1.4595 YVZZ= -1.7388
XXYZ= 0.0000 YVYZ= 0.0000 ZZZY= 0.0000

```

```

1 (A1)--O -20.25156 28.66068
2 (A1)--O -1.25762 2.37599
3 (B2)--O -0.59393 1.47214
4 (A1)--O -0.45975 2.22192
5 (B1)--O -0.39262 2.52873
6 (A1)--Y 0.26493 2.73962
7 (A1)--Y 0.26493 2.73962
Total kinetic energy from orbitals= 7.451891721432D+01
No NMR shielding tensors so no spin-rotation constants.
Final structure in terms of initial Z-matrix:
O
H 1.1.R1
H 1.1.R1,2.T1
Variables:
R1=0.98926345
O 0.00000000
H 1.1.XCNG-HRXTORRHFSTO-3GXH2O1YK49108X311-Jan-2006GXYP RHF/STO-3G
OPT ROB=FULL GFINDITYWater molecule: geometry optimization 6/4YK0.1Y
O,-0.1005290796,0.,-0.07783793YH,-0.0619270901,0.,0.9106720871YH,0.866
1597272,0.,-0.287968647YVersion=Sub64S-G03RevC.02XState=1-A1VHF=-74.96
59012YRMSD=5.873e-11YRMSF=1.061e-04YDipole=0.5317657,0.,0.411737YF6=CO
2Y [C2(O1),SGV(H2)]YF#

```

RHF/STO-3G による分子軌道の等高線表示 (エネルギーの単位は a.u.)

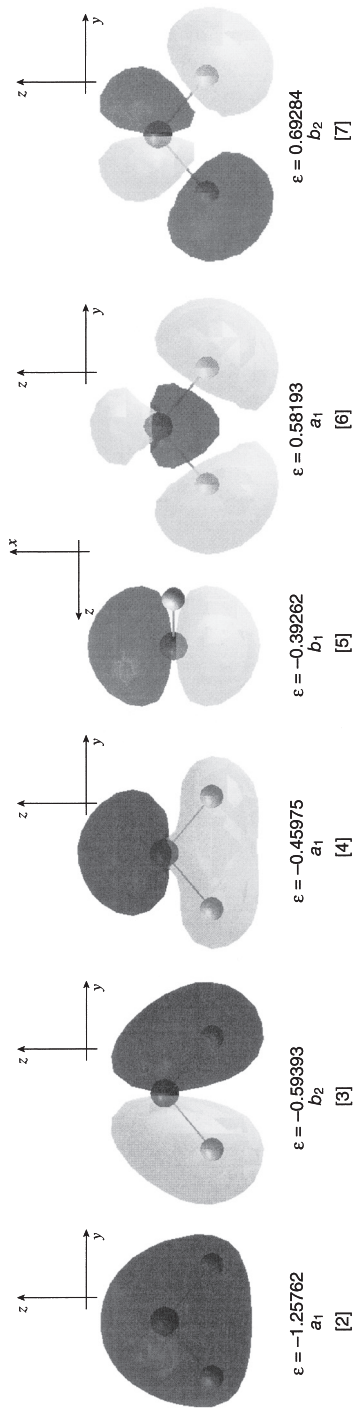


図 5-3 Gaussian 03 による水の RHF/STO-3G による構造最適化計算の出力ファイル

これらは基底関数や近似レベルを変更することによって改善することが可能です。基底関数を 6-31G* にした RHF/6-31G* では、 105.57° 、現在多用されている B3LYP/6-31G* では 103.60° になります。Derivative Info. には残存する力が示されていますが、構造最適化終了時にはほとんど 0 になっています。以下に、最適化構造の座標と、分子軌道係数、及び Mulliken 密度解析で電子を各原子に割り当てた場合に結合状態の解析結果を与える Condensed to atoms、原子の電荷や双極子モーメントが出力されています。分子軌道係数に基づいて分子軌道をセンターに登録されたプログラム moview[18] によって等値面表示した図 5 を併せて示します。出力の最後の部分に主要な計算結果について桁数を増やした出力があります。Z マトリックスを使用した場合には、Z マトリックス指定での構造パラメータも出力されます。

(4) エラーに対する対処

正常に計算が終了していれば、出力ファイルの最後に図 5 のように

```
Normal termination of Gaussian 03 at Thu Mar 16 12:35:44 2006.
```

と終了時刻とともに出力がされます。

構造最適化が終了しないなどの何らかの問題が生じて終了した場合には、

```
Error termination via Lnk1e in /opt/apl/sp/g03/1502.exe.  
Job cpu time: 0 days 10 hours 13 minutes 40.5 seconds.  
File lengths (MBytes): RWF= 114 Int= 0 D2E= 0 Chk= 9 Scr= 1
```

がエラーの起こったプログラム部分とともに出力されます。この場合には 1502.exe というエネルギーの計算を行うプログラムで問題が起きたこと、この直前の出力からエネルギーが収束しなかったということがわかります。

ときには、出力ファイルにはまったくエラー出力がなく、qstat コマンドで確認してもジョブが実行されていないことがあります。一番多いのは、CPU 時間あるいは経過時間が指定された時間を越えてしまったというもので、この場合には、制限時間を越えてしまってジョブがキャンセルされたという内容のメールが root@sp0.cc.nagoya-u.ac.jp (Super-User) から nucc に送られていることがあります。

```
Request name: g03.cmd  
Request owner: w4900Xa  
Mail sent at: Sat Apr 23 14:10:13 JST 2005
```

```
Per-request elapse time limit exceeded.  
Request killed.
```

図 6 制限時間を越えたジョブのキャンセルを知らせる電子メール

また、スクリプトファイルの一行目で -eo に続けて指定したエラー出力ファイルになんらかのエラーの痕跡が残されていることがあります。FORTRAN の実行エラーが大量に出力されている場合には、問題の特定が困難なこともよくあります。単にメモリーやディスクの指定量が小さす

ぎて出力エラーが出ているのであれば、これらを大きくするのがひとつの解決法ですが、プログラムのバグの場合もあるので、どうしても原因がわからない場合には IT 相談に持ち込んでください。いずれにせよ、異常終了した場合には、異常終了の直前からさかのぼって問題の原因を探します。

【より進んだ使用法】

長時間ジョブなどで、終了時刻が予想しにくい場合にはジョブ終了時に nucc にメールを送信することができます。スクリプトファイルの一行目に -me オプションを付け加えます。

```
# @$-q p8 -eo -o g03p.err -lT 100:00:00 -lp 8 -me
```

ジョブが終了すると以下のようなメールが送られてきます。

```
Request name:   g03.cmd
Request owner:  w4900Xa
Mail sent at:   Thu Mar 16 15:37:20 JST 2006

Request exited normally.

_Exit() value was: 0.
```

図 7 ジョブの正常終了を知らせる電子メール

V. まとめ

今回は、Gaussian 03 を利用した電子状態の計算の研究の上での位置づけと注意事項について説明を行いました。もっとも直感的でわかりやすい構造計算をとりあげ、水の構造最適化を例にして、Gaussian 03 による分子軌道法計算の一連の手続きについて具体的に解説しました。入力データの作成、HPC2500 による計算の実行法、出力データの扱い、エラーの対処法について示しました。次回は、便利な構造指定方法である Z マトリックスの解説と、基底関数についての解説を行います。

参考文献

- (1) 日本化学会編, "実験化学講座 12" 第五版, 丸善, 2004 年
- (2) 山辺 信一, 和佐田 裕昭, 筒井 祐子: "分子軌道法計算 - Gaussian94 を利用して - (その 1)", 名古屋大学大型計算機センターニュース, Vol. 29, No. 1, 19-38 (1998)
- (3) 和佐田 裕昭, 筒井 祐子, 山辺信一: "分子軌道法計算 - Gaussian94 を利用して - (その 2)", 名古屋大学大型計算機センターニュース, Vol. 29, No. 2, 88-114 (1998)
- (4) 筒井 祐子, 山辺 信一, 和佐田 裕昭: "分子軌道法計算 - Gaussian94 を利用して - (その 3)", 名古屋大学大型計算機センターニュース, Vol. 29, No. 3, 197-215 (1998)
- (5) 山辺 信一, 和佐田 裕昭, 筒井 祐子: "分子軌道法計算 - Gaussian94 を利用して - (その 4)", 名古屋大学大型計算機センターニュース, Vol. 29, No. 4, 277-293 (1998)

- (6) 山辺 信一, 和佐田 裕昭, 筒井 祐子 "分子軌道法計算 - Gaussian94 を利用して - (その5)", 名古屋大学大型計算機センターニュース, 1999年, Vol. 30, No. 1, 16-38 (1998)
- (7) 和佐田 (筒井) 祐子, 和佐田 裕昭, 山辺 信一: "分子軌道法計算 (その6) - Gaussian98 を利用して - "名古屋大学大型計算機センターニュース, Vol. 31, No. 3, 195-213 (2000)
- (8) 和佐田 (筒井) 祐子: "分子軌道法計算 (その7) - Gaussian03 による金属錯体の計算 - ", 名古屋大学情報連携基盤センターニュース, Vol. 3, No. 3, 179-193 (2004)
- (9) P. Atkins, R. Friedman "Molecular Quantum Mechanics", 第四版, Oxford University Press, New York, 2005年
- (10) 藤永 茂, 「入門 分子軌道法 - 分子計算を手がける前に -」, 講談社 1990年
- (11) A. Szabo, N. S. Ostlund "Modern Quantum Chemistry: Introduction to Advanced Electronic Structure Theory", Dover, 1996. 邦訳 大野 公男, 望月 祐志, 阪井 健男 訳「新しい量子化学 - 電子構造の理論入門 -」上・下, 東京大学出版会, 1987年
- (12) M. Springborg "Methods of Electronic-Structure Calculations From Molecules to Solids", John Wiley & Sons, New York, 2000
- (13) K. Raghavachari, J. B. Anderson J. Phys. Chem. 100, 12960-12973 (1996)
- (14) M. Head-Gordon J. Phys. Chem. 100, 13213-13225 (1996)
- (15) http://www.gaussian.com/g_ur/g03mantop.htm を参照のこと
- (16) A. Frisch, M. J. Frisch, G.W. Trucks "Gaussian 03 User's Reference", Gaussian, Inc. (2003)
- (17) 和佐田 (筒井) 祐子: "並列 Gaussian98 による効率的な分子軌道法計算 - 汎用計算サーバを利用して - ", 名古屋大学大型計算機センターニュース, Vol. 32, No. 3, 192-203, 名古屋大学大型計算機センター (2001)
- (18) 高橋 一郎, 和佐田 裕昭, 筒井 祐子: "分子軌道可視化プログラム moplplot 及び moview の紹介", 名古屋大学大型計算機センターニュース, Vol. 29, No. 4, 294-314 (1998)

(わさだ (つつい) ゆうこ: 名古屋市立大学システム自然科学研究科)

(わさだ ひろあき: 岐阜大学地域科学部)