

Gaussian を使う前にちょっと気をつけるとよいこと — IT 相談を通じて —

和佐田 裕 昭 和佐田 (筒井) 祐 子

はじめに

名古屋大学情報連携基盤センターの IT 相談のなかで分子軌道法計算プログラム Gaussian を使った分子軌道法に関する相談に応じていますが、さまざまな質問がある中で気になったことについて以下に少し述べてみたいと思います。できることならば、分子軌道法を用いた計算を実施される前に参考にしていただければ幸いです。

(相談 1) 漠然と分子軌道法計算を使った研究がしたい・・・

この種の相談に対しては、私たち相談員の側も漠然とした回答しかできなく、あまり建設的な議論はできません。

最近、パソコンが普及したこと、さまざまな学際領域の研究を行うための組織が設置されてきたことなどの結果、分子軌道法を用いた計算について見聞する機会が多くなったためでしょうか、漠然と分子軌道法計算をやってみたいといった相談がみられます。しかし、忘れてならないことは、分子軌道法の計算は化学物質に関する計算であることです。つまり、アプローチがなされる出発点は化学分野でないにしても、実際の計算は化学の研究の一環になっているとの認識を持ってください。化学に興味がない場合、漠然と分子軌道法を使った研究がやってみたいなどの考えは持つべきではないと思います。

(相談 2) 実験で扱っている物質そのものについての分子軌道法計算をしたい・・・

この種の相談も多いのですが、相談を受けていますと、実験的研究で扱っている物質の分子構造がよく理解できていないことがあります。高分子系の物質中での電荷分布などを計算的手法で調べたいので、Gaussian を使ってみたいといった場合などがこれにあたります。

この種の相談で最も困るのが、扱いたい物質がどのような分子構造なのかがよくわからない、そのためモデル構造もつけれないことです。複雑な物質を扱っている場合には詳細な構造がわからない場合もあると思われませんが、分子軌道法を用いた計算を実施するためには計算の対象となるモデル分子の構造は完全に確定されていなければなりません。時として、私たちにモデル作成を代行してもらえればと頼まれるようなことすらありますが、それは非常に難しいことです。私たちは相談者との共同研究を行なっているわけではないうえ、ほとんどの場合、化学分野の中での専門も異なっています。計算の心臓部であるにもかかわらず、詳細な構造が不明な物質のモデ

ル構造を作成することはできません。したがって、相談の前に、計算の対象となるモデル分子の構造を研究室で十分考察し、確定する必要があります。モデルが決まるまでは、具体的な計算に進むことはおあずけにしてください。

その他に気付くこととして、モデル分子は確定しているのですが、そのモデル分子の構造がいわゆる化学の常識から考えておかしい場合が見られることがあげられます。分子軌道法を用いた計算が、頻繁に行われるようになった結果、以前のように化学分野以外にもユーザが広がってきたことがその原因と思われます。例えば、炭素は普通は4価であるといったようなことは、化学系の分野の人々にとっては当然のことですが、化学以外の人々には常識になっているとは言えません。

Gaussian は、計算の対象とするモデル分子の構造を、入力データとして与えれば、その構造が化学の常識から外れたものであっても計算を実行してしまいます。研究の目的が、化学の常識から外れた非常に新規な構造の物質を対象にしている場合にはよいのですが、私たちの IT 相談での経験では、間違った分子構造モデルを正しいものと思い込んでいるケースがあるので、慎重に考えねばならないと思います。下手をすると時間と予算を使って、大量の計算を行なってしまったから元々のモデル構造が化学では考えられないものだったので、すべて間違いだったということになりかねません。そこで、Gaussian に限らず分子軌道法関係の計算を実行する前には、最低限の化学に関しての知識を得ておく必要があると思います。

ここで言う最低限とは、化学系の3年生レベルの化学の知識を意味します。理科系の場合、大学1・2年生の段階で、化学系の授業をいくつかは受講している人がほとんどと思いますが、これでは十分とは言えません。しかし、現実には化学系の3年生レベルの知識を得ることは難しいと思いますので、次善の策として、化学系の人と詳細に打ち合わせを行なっていただきたいと思います。そして、分子軌道法の計算を実行する前に、モデル分子の構造の化学的妥当性についての検討は済ませておくとよいと思います。

(相談3) 細かいことは研究上の秘密(特許、企業)で見せられません・・・

最近経験することが多くなったのが、研究上の秘密の都合で、相談も説明もあいまいになるケースです。「ある原子に例えばプロトンが結合していたとしたらどのようなようになるのかを知りたいので、分子軌道法計算をしたいのですが、できるでしょうか？」などと言った質問が持ち込まれることがあります。このような場合、具体的にどんな分子ですかと聞き返すと、「何々みたいな分子です。」と返事がかえってきて、あれこれ質問をしているうちに、「その部分については研究上の秘密で話せないのです。」とか、「先生の許可がないと説明できません。」となることがあります。

特許などの関係、競争の激しい分野での論文発表や学会発表の都合で細かいことを話せない事情は非常によく理解できます。しかし、このようなあいまいなやりとりでは、何ひとつ科学的に得るものではありません。すなわち、IT相談に質問する意味がないでしょう。しかし、研究上の秘密を保持しつつ、わからないことを質問したいことはあるでしょうから、そのような場合はプロジェクトの最高責任者の人自身が相談に同伴するのがふさわしいと思います。学生だけに質問に行かせるが細かい説明はさせないようなやり方は、学生をあたかも子供の使いに出しているよ

うで、よくない方法であると思います。あるいは、プロジェクトの中に分子軌道法の専門家を配置して、プロジェクト外の人たちには質問をしなくてもよい研究体制を作るべきでしょう。多くの企業ではそのようにしているようです。自分たちからは何も情報提供をせずに、得るものだけを求める虫のいい姿勢では結局駄目なのです。

(相談 4) 大きいモデルの計算がしたい・・・

相談者が持ち込む系が大き過ぎる場合もよく出くわします。Gaussian ではかなり大きなモデルまで扱うことができます。しかし、あまりにも大きいモデルですと、計算資源や予算の要求が増えるのはもちろんのこと、計算終了後の解析が困難になってしまいます。自分たちが見たい部分をうまく抽出した適切なモデル分子を計算の対象にするようにしてください。

どうしても大きい分子を計算する場合でも、始めは最終目標の部分構造などを対象にして、それを次第に大きくして行くのがよいでしょう。計算対象が小さい場合には計算もすみやかに終了しますので、万が一誤った方向に進んでしまっていたとしても、被害は軽微で済みます。大きいモデルにいきなり挑戦して多大の時間と予算を使ってしまってから間違っていたとなると被害が大きくなってしまいます。

小さな分子から始める場合の利点としては、たくさんの計算を実施できるので、Gaussian の計算に十分に慣れることができることもあげられます。研究手段に慣れつつ次第に目標に接近するためにも、最初から大き過ぎるモデルは扱わないように心がけていただけたらと思います。

(相談 5) 状態、電荷、スピン多重度がわかりません・・・

さまざまな質問に対応していて、これは問題ではないだろうかと思う事柄のひとつに、計算しようとする化合物の状態についての前準備、下調べがなされていないことがあげられます。

計算しようとしているモデル分子の状態が、基底状態なのか励起状態なのか、対象とする分子が中性なのか、カチオンなのかアニオンなのか、スピン多重度は何なのか等を計算を実行する前に確定してください。これらの項目について私たちが質問すると、それはわかりませんとの返事をされることも多く、こうなると困ってしまいます。

実験をしている際に出くわした物質の性質を、分子軌道法の立場からも研究してみたいと思った場合は、フラスコに溶媒を入れて、試薬を混合して・・・とは違います。モデル分子に関しての最低限の情報である電荷とスピンに関する情報を入力データとして用意する必要があります。分子の構造とならんで、これらについても相談の前に考えておいていただけるとよいと思います。

(相談 6) 現実的に使用することのできる方法論はどれ・・・

現実的に採用できる方法の選択は大切な注意点です。現実的に採用できる計算方法は、計算に割り振ることのできる予算と時間に大きく依存します。

できる限り目的とする状態を正確に表現することが可能な、精密な方法を採用して計算を行いたいのは誰しものことです。しかし、計算だけのために湯水のごとく時間と予算を使用できるの

は、かなり限られた特殊なケースといえるでしょう。大抵の場合は、予算不足でギブアップ。予算が潤沢にある場合は、今度は学会発表や論文発表が差し迫っているといった方面からの要求のため、急いで計算結果を出さねばということもあるでしょう。そこで、現実的な要請から、計算に用いる方法論を絞り込むことになります。

別の言い方をすれば、近似の精度を下げる訳です。精度を下げてもすべての物性が同じように精度が下がる訳ではないので、自分の研究目的を達成するためにはどのような近似を採用すればよいかを検討して、適した方法論を選択してください。具体的なことについては、IT相談の際に質問してください。また、参考文献に示した以前のセンターニュース⁽¹⁾⁻⁽⁷⁾などを参照してください。

(相談 7) 分子軌道の絵を描きたい・・・

最近、よく出会うようになった相談が分子軌道などのデータを絵で表現したいとの内容のものです。

分子軌道法計算が終わったら、単に分子構造を見るだけではなく分子軌道そのものの様子を検討してください。しかし、分子軌道法計算の出力データは大量の数字のかたまりです。このためその中に有用な情報が含まれていても、それらを解析するのは面倒なものです。そこで登場するのが、数値を図として表現することのできるソフトウェアです。これにはさまざまなものがありますので、ユーザが使いやすいものを活用されるとよいでしょう。例えば、名古屋大学情報連携基盤センターで開発されたものには moplots & moview システムがあります。これはセンターで開発されたもので、何か要望があった場合もすみやかに対応可能なので、その点で市販のソフトより融通性が高いと思います。

分子軌道を解析することを含めるだけで、実験的研究では見えない化学の本質が垣間見えて来るので、ぜひ実施すべきことです。このために積極的に絵を活用してください。

(相談 8) 分子模型を積極的に活用しましょう・・・

分子の構造を最適化するために Gaussian を使用する機会が多いのですが、具体的な入力座標データを作る方法に関しての質問があった場合への回答のひとつが、分子模型の活用です。

入力データとして使う初期構造パラメータを得るため、分子模型セットを使用することは非常に便利です。分子模型セットを使って、自分がこれから計算しようとしているモデルはどんなものなのかをよく眺めてみることで、さまざまなインスピレーションを得ることができます。入力形式に分子内座標の形式を用いる場合ならば、分子模型を組んだ後、分度器で結合角や二面角を測定してそれを入力パラメータにしてみてもどうでしょうか。計算がうまくできて最終的に得られる最適化パラメータと分度器を用いて見積もった値とを比較した場合、それらがあまり変わらないことも多くあります。

分子軌道法計算を実施したい場合に、まずお勧めしたいのは分子模型セットを用意して、それを手元に置き、あるいは研究室の皆でそれを使って検討することです。

(相談 9) ワークステーションを購入したいのですが・・・

IT 相談の立場からはイレギュラーな質問項目ですが、この種の相談も時々あります。

センターの計算機を使用するのではなく、研究室にコンピュータがあれば誰に気兼ねすることもなく、計算時間を気にすることもなく計算ができるように思えます。確かにそのような側面は強いので、手元に計算機を置いておくことは悪いことではありません。そこで、どのような計算機を研究室に導入したらよいかのアドバイスをすることはありますし、研究室にある計算機上で Gaussian を使った分子軌道法計算をした場合の問題点についての相談にも応じています。

ただ、センターのコンピュータを利用した方が手軽であり、意識を計算だけに集中できる上に、コンピュータの管理をしなくてもよい点は見逃せない利点のように思えます。とくに使用頻度が低い場合にはセンターは定期的にコンピュータやソフトウェアを更新するので、型落ちの心配がありません。また、コンピュータが実験室に置いてあると、発熱や電気容量の問題が生じますし、騒音が大きいこともあるので、研究環境の整備の点からも考えものかも知れません。このあたりのことになると、好みの問題になってきます。

(相談 10) 同系統の計算例について論文調査をしましょう・・・

これは研究をする際には当然のことなのですが、計算を行なう前に多くの文献に自分たちであたってください。

先行研究を調べることで、どのようなモデルを作成すべきか、どのような方法論を用いるべきかなどの情報を得ることができるからです。IT 相談の際には、自分たちで見つけた参考文献を持って来ていただくと非常に重宝します。私たちがそれらの文献を見ることで、適切なアドバイスを手がかりにできるからです。

(相談の方法) 電話、メールでなく面談相談が最適です・・・

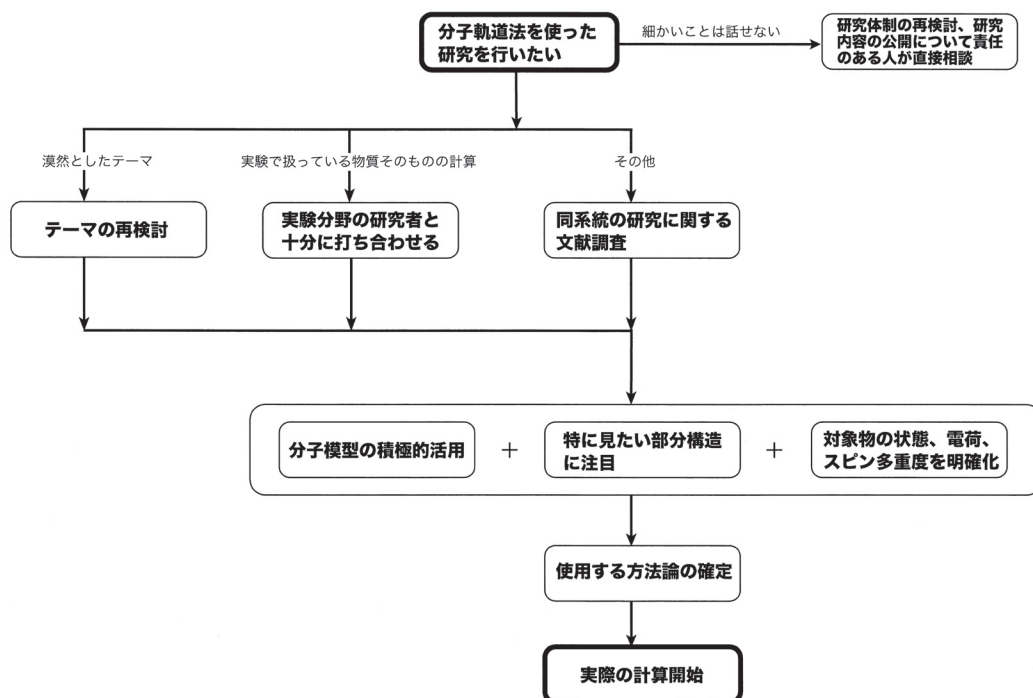
最後に、相談のやり方についてですが、現在はメールや Web での相談も可能となっています。しかし、これらは現実問題として何の役にも立ちません。

細かい分子構造や電子状態の解析、入力データの作成の仕方などの説明には、実際に手取り、足取りのような感じでの作業過程が必須だからです。時には、私たちが相談者の目の前で実際にデータを作成したり、計算開始を実演したり、データの解析作業を試みたりといったことをします。これらは実験室での実験指導を先輩の大学院生が後輩たちに行なうのと非常によく似ています。実地指導を一切行なうことなくメールだけで実験指導を完璧に行なうことが難しいのと同じで、分子軌道法計算についての相談もメールでは極めて困難です。

ですから、メールや Web での相談は、あくまでも面談による相談の予約程度に考えてください。電話による相談も同じことです。面談による相談を通じてのみ、実のあるアドバイスを得ることができるでしょう。センターまで来ることは面倒ですが、その手間は必要なものと割り切ってください。

まとめ

これまでの IT 相談の過程で気付いたことをいくつか述べてきました。これら以外にも色々ありますが、上記したことは分子軌道法の計算を開始する前にきっちりと押さえておくと、その後の研究の遂行が円滑になると思います。概略をフローチャートに示しました。細かい点は、センターニュースの解説⁽¹⁾⁻⁽⁷⁾などを参考になさってください。



参考文献

- (1) 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)
- (2) 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)
- (3) 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)
- (4) 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)
- (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 5)" 名古屋大学大型計算機センターニュース, Vol.30, No.1, 16-38 (1999)

- (6) 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)
- (7) 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)

(わさだ ひろあき: 岐阜大学地域科学部)

(わさだ (つつい) ゆうこ: 名古屋市立大学大学院システム自然科学研究科)