量子化学計算ソフトウェア

Gaussian 09 リリース -新機能のご紹介-

本年6月にGaussian社製量子化学計算ソフトウェアGaussian 09がリリースされました。Gaussianは、世界で最も利用されている量子化学計算で、Gaussian 09は約6年ぶりの新バージョンとなります。Gaussian 09では、最先端の技術や手法を採用した新機能の追加や大幅なパフォーマンスの改善が行われました。本稿では、Gaussian 09ならびに同時リリースされたGaussView 5の新機能や改善点についてご紹介します。

ONIOM法の機能拡張

ONIOM法は、QM/MM計算の代表的な方法の一つです。生体高分子などの巨大分子をいくつかのレイヤーに分け、レイヤーごとに量子化学計算や分子力学計算を適用することで、巨大分子の電子状態の評価や構造最適化を行うことができます。新バージョンでは、以下の新機能の追加や機能改善が行われました。新機能により、より大規模な系の取り扱いが可能となり、さらに遷移状態探索や反応機構の解析が行えるようになりました。

- 遷移状態の構造最適化
- IRC計算
- MM部分電荷存在下での振動計算
- 溶媒効果（PCM）
- 計算速度の大幅な向上
- 力場のカスタマイズ機能
- 解析微分と振動計算を含めたAM1、PM3、PM3MM、PM6、PDDG半経験的方法のサポート（パラメータはカスタマイズ可能）

溶媒和モデルの機能改善

溶液中の分子構造や電子状態を評価するために溶媒和モデルとして自己無撞着反応場（SCRF）法が広く利用されています。

新バージョンでは、SCRF法に次の改善や新機能が追加されました。新機能により、溶液中の分子に対して、より高速な最適化計算や精度の高い振動数計算が行えるようになりました。また、溶媒効果を考慮した分子発光スペクトルの計算が可能になりました。

- PCM法に新しいアルゴリズムを採用し、計算速度を大幅に改善
- 励起状態計算のためのState-specific (SS)モデルに基づく溶媒効果
- 溶媒和モデルSMDの搭載

励起状態計算の機能拡張

近年、分子設計や材料設計において励起状態計算の必要性が高まっています。新バージョンでは、励起状態計算に関する以下の新機能が追加されました。新機能により、密度汎関数法（DFT）による励起状態の構造最適化や電子状態間の遷移に関する詳細な評価が行えるようになりました（図1）。

- Time-Dependent DFT (TD-DFT)における解析的エネルギー微分
- EOM-CCSD法の搭載
- 電子状態間の遷移に伴う振動状態間の遷移確率の計算：
  Franck-Condon 項， Herzberg-Teller 項，Franck-Condon Herzberg-Teller 項

新しい汎関数の追加

密度汎関数計算で使用する汎関数が新たに追加されました。追加された汎関数には、近年注目される長距離の補正を含む汎関数や経験的分散力を含む汎関数、さらにMP2類似の摂動項を加えたDouble-Hybrid汎関数があります。新たに追加された汎関数は次のとおりです。

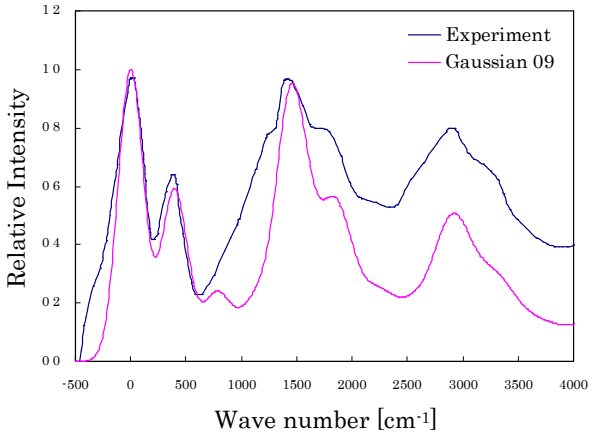

図 1　アントラセンの$S_0 \rightarrow S_1$励起に由来する吸収スペクトル：Franck-Condon因子を考慮したGaussian 09の計算結果と実測値の比較

◆交換汎関数

BRx, PKZB, wPBEh, PBEh

◆相関汎関数

BRC, PKZV

◆Standalone汎関数

tHCTH, M06L, B97D

◆Hybrid汎関数

X3LYP, HSEh1PBE, HSE2PBE, HSE1PBE, PBEh1PBE, TPSSh, BMK, M06, M06HF, M062X

◆Long range corrected (LC)汎関数

LC-wPBE, CAM-B3LYP, wB97XD, wB97, wB97X, LC- + pure汎関数の組み合わせ

◆Double hybrid汎関数

B2PLYP, B2PLYPD, mPW2PLYP

その他の追加された機能や改善点

前述のほかに追加された機能や改善点を以下に示します。

◆新機能

・新しい半経験的ハミルトニアン：PM3MM, PDDG, PM6
・ROMP3, ROMP4, ROCCSDによるエネルギー計算
・高精度エネルギー計算のためのハミルトニアン：W1RO, W1BD, G4
・Tight-binding DFT計算：DFTB, DFTBA
・周波数依存ラマン光学活性強度(ROA)の解析的計算
・DFT計算による解析的超分極率計算
・構造最適化アルゴリズム：GEDIIS
・フラグメントベース（部分構造）の初期軌道作成
・4点差分による数値的振動計算
・CISとTDにおけるNatural Transition Orbital解析
・拡張基底で得られた被占軌道情報を最小基底へ射影した後にMullikenポピュレーション解析ができるようになりました。

◆効率化

・大規模分子系に対するHFとDFTの並列化効率が改善されました。
・ONIOMにおける振動計算が高速化されました。
・基準振動モードの結果がcheckpointファイルに保存されるようになりました。保存されたデータを可視化やIRC計算に使用できます。
・半経験的方法、HF、DFT計算の振動計算で、計算途中からのリスタートができるようになりました。
・SVP、TZVP、QZV基底用のDensity fitting基底が追加されました。

GaussView 5の新機能

GaussViewは、量子化学計算ソフトウェアGaussianに対応したグラフィカルユーザインターフェースです。分子構造構築、計算設定、計算結果の可視化などGaussianの操作をマウス操作などで簡単に行うことができます。Gaussian 09のリリースに合わせて、新バージョンGaussView 5がリリースされました。GaussView 5の新機能は以下のとおりです。

◆構造構築関連

・指定原子群の中心にフラグメントを配置する機能
・同位体元素の指定
・PDB Residue Editor / PDB Secondary Structure Editor： アミノ酸残基やタンパク質の2次構造単位の水素削除・追加機能
・原子・フラグメント・アミノ酸残基など様々な基準での部分構造の選択

◆計算設定関連

・部分構造ごとの電荷・多重度の指定
・NMRスピンースピンカップリング計算における原子選択
・振動計算における基準振動モードの選択
・Additional Input（Extra Input）用タブの追加

◆可視化関連

・振動計算における同位体効果の比較表示

◆その他

・Atoms Group Editor： 原子のグループ分けと対応した色分け表示
・グラフやスペクトルのイメージ保存
・スペクトルデータのテキストファイル出力

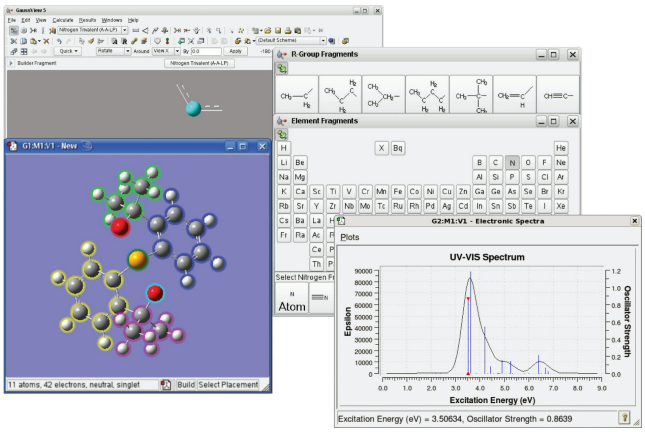

図 2 GaussView 5の表示例