量子化学計算ソフトウェア

Gaussian 16リリース

Gaussianは、量子化学計算ソフトウェアとして最も有名で利用者の多い製品です。1970年の初版以降これまでに世界的に広く利用され、分子設計・構造解析・化学反応解析などで多大な成果をもたらしています。利用者の増加や適用分野の広がり、さらに量子化学計算の発展とともに、ソフトウェアの機能も都度拡充されバージョンアップがなされてきました。本年1月には、約7年ぶりのメジャーバージョンアップ版Gaussian 16ならびにグラフィカルユーザインターフェースであるGaussView 6がリリースされました。本稿では、Gaussian 16およびGaussView 6の新機能について紹介します。

Gaussian 16

新機能

本バージョンでは、励起状態の取り扱いやスペクトル計算における新機能が多く追加されています。

- 時間依存密度汎関数法(TD-DFT)を用いた解析的振動計算(当該機能を用いたIR・Ramanスペクトル、遷移状態構造の最適化とIRC計算が可能)
- 振動スペクトルの非調和項の考慮
- 分子振動準位を考慮した電子円偏光スペクトル、共鳴ラマンスペクトルの計算
- EOM-CC法による構造最適化
- 新しいDFT汎関数(M08HX, MN15, MN15L)
- 新しい半経験的手法(PM7)

機能改善

次に列挙するような、計算速度向上を図る機能が追加されています。

- Hartree-FockおよびDFT計算におけるGPU計算への対応(Linux環境でのNVIDIA K40・K80)
- 多くのCPUを使用した並列計算の効率改善
- CCSD計算時のI/O負荷軽減のためのメモリーアルゴリズムの最適化
- 構造最適化アルゴリズムGEDIISの改良
- 大きなActive space[>(10,10)]を用いたCASSCF計算の効率改善

標準設定の変更

初期設定として標準的に設定されていた値に変更があります。ハードウェアの発展に伴い計算速度が向上したことから、精度を向上させるような変更になっています。

- 積分精度の初期設定を10^{-10}から10^{-12}へ高精度化
- DFTのグリッドをFineGirdからUltraFineに変更
- メモリーの使用量が800MB(100MW)になり、多くのメモリーを確保
- TD-DFT計算において、解析的二次微分がデフォルトになり計算が高速化(G09では数値微分のみ)

GaussView 6

解析機能

GaussView 6には以下のような解析機能の拡充がなされています。

- 非調和項を考慮したIR・ラマン・VCD・ROAの表示
- SCRF計算の溶媒和空隙の表示(図1)
- 旋光分散スペクトルの表示
- 分子振動準位を考慮した各種スペクトル、およびDuschinky行列の表示

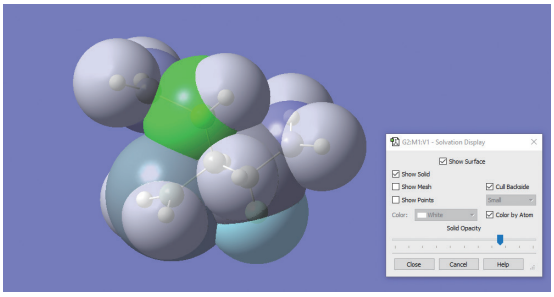

図1. SCRF計算における溶媒和空隙の表示

計算設定機能

計算の設定や管理を行う機能が拡充されました。多数の計算を一括して扱うことができ、利便性が向上しています。

- 計算サマリーの出力内容の拡充
- マルチジョブの一括設定(図2)
- GMMXアドオンツールを用いた配座探索
- SCジョブマネージャーによるジョブキュー管理
- 点群対称操作の機能拡充

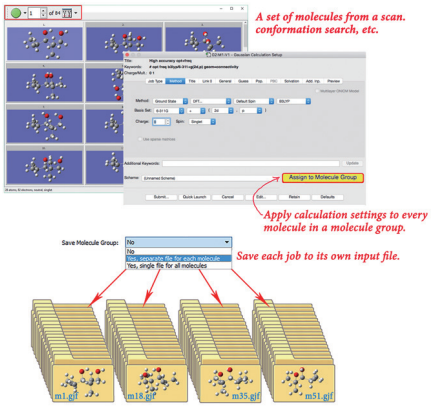

図2. 配座解析によって得られた84分子を一括して計算投入する例